



Analyse et simulation numérique de phénomènes liés à la combustion supersonique

Yves d'Angelo

► To cite this version:

Yves d'Angelo. Analyse et simulation numérique de phénomènes liés à la combustion supersonique. Dynamique des Fluides [physics.flu-dyn]. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1994. Français. NNT: . pastel-00568711

HAL Id: pastel-00568711

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00568711>

Submitted on 23 Feb 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

NS 18468 (4)

X

THESE DE DOCTORAT DE L'ECOLE NATIONALE DES PONTS ET
CHAUSSEES

Présentée par

Yves D'Angelo

Pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES

Spécialité : Mathématiques appliquées

Sujet de la thèse :

ANALYSE ET SIMULATION NUMÉRIQUE DE
PHÉNOMÈNES LIÉS À LA COMBUSTION
SUPERSONIQUE

Soutenue le 13 juillet 1994 devant la commission composée de Messieurs :

Roland BORCHI

Pierre PERRIER

Paul CLAVIN

Roger PEYRET

Vincent GIOVANGIGLI

Thierry POINSOT

Bernard LARROUTUROU

Philippe ROSTAND

02



Remerciements

En premier lieu, je tiens à exprimer mon extrême gratitude et mon plus profond respect à Bernard Larrouturnou. Patiemment, il a su me conseiller et m'orienter au cours de ma thèse, tout en me laissant la plus grande latitude dans mes travaux. Qu'il en soit ici justement remercié.

Sébastien Candel, mon professeur à l'Ecole Centrale, m'a dirigé vers ce sujet et vers le laboratoire de Bernard Larrouturnou. Ses conseils scientifiques et humains ont guidés mes premiers pas dans la recherche, et je l'en remercie.

Je suis très sensible à l'interêt que Messieurs Roland Borghi, Paul Clavin, Pierre Perrier et Roger Peyret témoignent pour mes travaux, en me faisant l'honneur de faire partie de ce jury. Je leur en suis très reconnaissant.

Je remercie tout particulièrement Messieurs Les Rapporteurs Vincent Giovangigli et Thierry Poinot d'avoir bien voulu approfondir la relecture de mes travaux.

Je voudrais aussi remercier Alain Dervieux et Loula Fezoui, ainsi que Monsieur Roger Peyret, pour leurs conseils avisés lors de mes séjours à Sophia-Antipolis.

J'ai en outre eu le plaisir de travailler avec Philippe Rostand, Michel Mallet, Michel Ravachol, Frédéric Chalot et Bruno Stoufflet dans le service des Méthodes Numériques Avancées de Dassault Aviation. J'ai pu grâce à eux élargir le champ de mes connaissances dans les domaines de l'analyse numérique et de la modélisation physique des écoulements fluides. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma reconnaissance.

Je voudrais également saluer les membres des équipes de recherches au sein desquelles j'ai pu travailler : le projet Sinus et le CERMICS à Sophia-Antipolis, Dassault Aviation à Saint-Cloud. Parmi ceux-ci, mon attention se porte plus particulièrement peut-être vers Pascal Mons, Fabienne Roussel, Adèle Barrière, Claudine Kasbarian, Guillaume Le Franc, Serge Phiperno, Armel de la Bourdonnaye, Nathalie Glinsky-Olivier, Nathan Maman, Gilbert Rogé, Bertrand Mantel, Marie-Pierre Leclercq et Jean-Michel Malé, sans oublier l'incontournable Robert Rivière.

Enfin, je tiens à remercier toutes les autres personnes qui m'ont aidé pendant ma thèse. Parmi celles-ci, la place de choix est occupée par Véronique Lods et Juliette.

Introduction générale

L'étude des régimes de vol d'un avion spatial hypersonique, muni de statoréacteurs à combustion supersonique, dits superstatoréacteurs, fournit de nombreux domaines d'intérêt pour les physiciens et les mathématiciens-numériciens. Ces "supersonic combustion ramjets" doivent être capables d'assurer la propulsion aérobie de l'appareil dans la haute atmosphère.

Bien qu'entamées dans les années 60, comme une extension des nombreux travaux antérieurs portant sur les statoréacteurs à combustion subsonique, les recherches sur le sujet furent délaissées au début des années 70 pour des raisons technologiques, stratégiques et techniques. Les problèmes de tenue thermique des matériaux, les performances encore médiocres et la sensibilité au dessin, le choix américain pour la navette spatiale, préférée à un avion hypersonique aérobie, l'insuffisance de l'efficacité des méthodes numériques par rapport à la puissance de calcul encore restreinte des machines de l'époque, ont contribué à décourager les bailleurs de fonds et ont tari la source principale des recherches et ainsi des articles et des projets sur la combustion supersonique.

Plus récemment, grâce aux progrès effectués parallèlement dans ces différents domaines de la technologie et des méthodes de calculs - l'apparition de nouveaux matériaux hautes températures, de nouvelles techniques performantes en analyse numérique, l'introduction sur le marché d'ordinateurs vectoriels et parallèles - la mécanique des fluides numérique est devenue un outil indispensable pour l'analyse et la conception de telles structures aérodynamiques. De nombreux projets d'avions hypersoniques ont ainsi pris naissance : NASP aux Etats-Unis, STAR-H, STS2000 par exemple en France, ou encore Sānger en Allemagne. Pour atteindre des nombres de Mach élevés et espérer bénéficier de l'allègement induit par l'usage de l'oxygène de l'air (sans apport de comburant), il semble bien pour l'instant que le seul moyen techniquement possible capable de propulser un appareil hypersonique aérobie jusqu'à des vitesses proches de celle de l'orbite basse soit le superstatoréacteur. Les études numériques sur le sujet sont maintenant légion et sont à l'origine de quelques revues bibliographiques intéressantes ([1] par ex.). Si l'on ne peut émettre de doutes sur la nécessité de développer à long terme la combustion supersonique interne ou externe, il est en outre de plus en plus évident que ses performances devront d'abord être estimées d'abord par la simulation numérique du véhicule complet qui utilise ce moyen de propulsion interne ou externe.

Les recherches menées dans cette thèse sur ce sujet se sont déroulées conjointement dans le laboratoire du CERMICS à Sophia-Antipolis et le Service des Méthodes Numériques Avancées de DASSAULT AVIATION à Saint-Cloud. Ces travaux sont constitués de deux parties cohérentes mais distinctes.

Le premier volet de la recherche consiste en l'étude des effets de chimie fine dans un écoulement prémélangé supersonique, régi par les équations d'Euler. Le but est de développer des méthodes numériques efficaces pour résoudre les équations de la combustion dans ce type de configuration. Le type de géométrie envisagé est celui de deux rampes (ou de pseudo-rampes courbes) symétriques bidimensionnelles planes. Pour des relations déterminées entre le nombre de Mach amont et l'angle des rampes, les ondes de chocs obliques formées par les rampes coalescent. Elles peuvent ainsi conduire à l'apparition d'une portion de choc quasi-droit - donc plus fort que les chocs obliques : le disque de Mach. Derrière ce disque, après un temps d'induction et une distance d'ignition à déterminer, peut alors se stabiliser une flamme. Par interaction avec les couches de fluide périphériques, l'écoulement peut redevenir globalement supersonique. Une telle solution se révèle très intéressante par rapport à la combustion subsonique classique, pour des nombres de Mach de vol supérieurs à 5 ou 6 [2, 3]. Toutefois, l'étude numérique d'écoulements réactifs fortement compressibles, pouvant comporter des ondes de chocs, implique essentiellement deux difficultés spécifiques. D'une part, l'apparition brutale de discontinuités au sein de l'écoulement induit de forts gradients de température et de pression pouvant être la source d'instabilités physiques et/ou numériques. D'autre part, mais de façon fortement corrélée, le caractère rapide et fortement exothermique de la chimie complexe air-hydrogène requiert une stratégie relativement coûteuse pour la résolution des équations de la cinétique chimique. Cette partie se conclut ainsi par l'adoption d'une méthode à pas fractionnaires, comportant un solveur Euler explicite puis un solveur spécifique pour la combustion. Parmi les solveurs essayés, deux se sont révélés plus efficaces : d'une part, le solveur de systèmes algébro-différentiels LIMEX [4], qui utilise une méthode d'extrapolation; d'autre part, mais dans une mesure sensiblement moindre, le solveur très utilisé de systèmes d'équations différentielles ordinaires LSODE, qui est fondé sur une formule d'intégration rétrograde [5]. Le but est d'obtenir un temps de calcul réduit lors de l'utilisation d'un module de chimie complexe dans un code de calcul aérodynamique bi(voire tri)-dimensionnel. Cette méthode a permis de simuler des écoulements réactifs supersoniques instationnaires ou stationnaires, pour une chimie complexe raide explosive air-hydrogène, et des géométries de taille réaliste (de l'ordre du mètre), avec des temps de calculs raisonnables (quelques dizaines d'heures sur un IBM RS 6000 560, ce qui équivaut à quelques heures CRAY YMP). Des calculs avec cinétique chimique complexe air-hydrocarbures ou air-hydrogène comparables sont menés par exemple au Department of Mechanical Engineering de l'Université Yale, pour des géométries du même type. Les écoulements sont subsoniques stationnaires, et en général axisymétriques [6]. Le type de méthode numérique est cependant différent. Elle consiste en une approche totalement

implicite en différences finies et se caractérise par l'emploi d'une méthode de quasi-Newton [7] globale, d'un algorithme de continuation et de méthodes multi-grilles [8, 9]. Une approche originale, fondée sur une formulation vorticit -vitesse [10], permettant d' liminer la pression, est  galement utilis e pour des  coulements tridimensionnels [11]. L'encombrement m moire, ainsi que le temps de calcul, demeurent encore importants.

Cette premi re partie se divise en trois chapitres.

Le premier chapitre constitue essentiellement une  tude ph nom nologique de l'apparition d'un choc oblique et/ou de l'effet de Mach, caus s par la d flexion d'un  coulement par une rampe. La configuration envisag e est bidimensionnelle, mais nous situons notre analyse dans un contexte simplifi  monodimensionnel. On suppose que le m lange gazeux air-hydrog ne est susceptible de s'enflammer derri re le choc oblique, c'est- -dire soit d' tre inerte, soit compl tement br l  et de composition connue. On se place successivement dans les cas o  les enthalpies sont des fonction affines en temp rature, ou bien de fa on plus r aliste des polyn mes du cinqui me degr  en temp rature. On d montre alors l'existence d'un nombre de Mach minimal en dessous duquel il n'existe pas de solution correspondant   un choc oblique stationnaire accro h    la rampe. Cette mise en  vidence est intervenue d'abord de fa on analytique pour le mod le simplifi  des enthalpies affines, et ensuite de fa on num rique, pour le mod le comportant des enthalpies polyn miales. Nous avons  galement d termin  les polaires de chocs donnant les conditions aval au premier choc et   un  ventuel choc r fl chi, en fonction de l'angle de la rampe et pour une plage de nombres de Mach incidents. Comme attendu, une r flexion "normale" s'est parfois r v l e impossible. Pour un cas pr cis, nous avons ensuite obtenu graphiquement, sur les polaires donnant la pression aval en fonction de l'angle de la rampe, les angles de la configuration consid r e en r flexion par effet de Mach, reproduite figure 0.1.

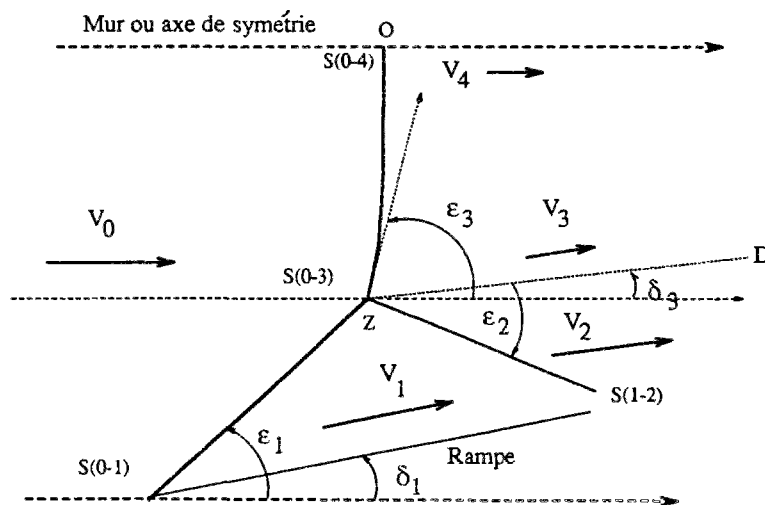


FIG. 0.1 - R flexion par effet de Mach

On s'int resse enfin dans ce chapitre aux distances d'induction locales,   l'aval de chaque

portion d'onde de choc de la structure considérée. Le principal résultat qualitatif mis en évidence est que la flamme pourra être beaucoup plus proche du point triple Z et sensiblement plus éloignée à l'aval de la portion de choc droit (zone 4). Le but de cette première analyse était essentiellement de constituer une étude préliminaire à l'étude numérique bidimensionnelle du troisième chapitre.

Dans le chapitre deux, nous avons effectué une analyse numérique de quelques schémas a priori possibles pour résoudre le système des équations de la cinétique chimique complexe et fortement exothermique d'un mélange air-hydrogène, couplé à l'équation algébrique de conservation de l'énergie :

$$\begin{cases} \frac{dY_k}{dt} = \frac{\Omega_k(T, Y, \rho)}{\rho} = \omega_k(T, Y) , \\ \epsilon(T, Y) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T) = \text{Constante} . \end{cases}$$

Une méthode de résolution simplement explicite pour ce système d'équations conduit, sous la condition de stabilité du schéma numérique, à des pas de temps prohibitivement petits. L'approche explicite pour la chimie est donc réservée aux cas où le pas de temps lié à l'aérodynamique est très petit. Pratiquement, ce type de situation se rencontre lorsque le pas d'espace local est très réduit, typiquement en simulation numérique directe [12, 13]. Pour tenter de pouvoir utiliser de plus grands pas de temps, plusieurs pistes ont été suivies.

Pour une cinétique raide mais globalement endothermique ou faiblement exothermique, des approches totalement implicite ou implicite linéarisée, incluant la résolution couplée ou non des équations discrétisées de conservation des espèces et de l'énergie par une méthode de Newton, conduisent à des schémas numériques tout à fait utilisables en pratique [14]. Pour une chimie fortement exothermique, comme la combustion de l'hydrogène dans l'air, ces schémas ont surtout montré un comportement extrêmement instable en terme de limitation du pas de temps et donc leur inadéquation à la résolution de ce type de cinétique. L'utilisation de méthodes implicites multi-pas ou de méthodes d'extrapolations, plus élaborées et plus coûteuses, s'est révélée beaucoup plus efficace. Ces méthodes sont disponibles par l'intermédiaire des solveurs spécialisés cités plus haut.

Dans le troisième chapitre est exposée la stratégie de pas fractionnaires effectivement employée pour les simulations bidimensionnelles. La discrétisation spatiale est effectuée selon une approche volumes finis non structurés. La résolution à chaque pas de temps comporte ensuite deux étapes. Les équations aérodynamiques sans termes sources sont d'abord résolues à l'aide d'un solveur de Riemann explicite incluant les extensions multi-espèces des flux de Roe et de Osher, tenant compte en outre des lois d'états réalistes, ce qui influe de façon non négligeable sur le temps de calcul. Le système algébro-différentiel constitué de l'équation algébrique de conservation de l'énergie et des équations différentielles ordinaires de conservation

des espèces, est ensuite intégré par l'emploi d'un solveur spécifique (LSODE ou LIMEX) [4, 5]. On suppose dans cette deuxième étape que les variables conservatives ne sont pas affectées par la combustion. Cette méthode de pas fractionnaires peut être également couplée à un algorithme de raffinement- déraffinement de maillages [21]. Toutefois, le critère de décision pour le raffinement est délicat et plusieurs essais préalables sont nécessaires pour le mettre au point, qui peuvent s'avérer excessivement coûteux pour des simulations d'écoulements réactifs. Ce chapitre se termine par quelques résultats bidimensionnels stationnaires et instationnaires. Nous avons pu ainsi réaliser des films montrant la dynamique de l'allumage et pu mettre en évidence de fortes instabilités liées au type de configuration étudiée. En effet, des conditions opératoires voisines (léger écart sur le nombre de Mach et la température de l'écoulement prémélangé), peuvent conduire à des comportements radicalement différents. C'est ainsi que l'on a pu observer ou bien un allumage trop violent, conduisant au désamorçage de l'écoulement (la flamme occupe tout le domaine à l'aval d'une détonation qui remonte vers l'entrée), ou bien assister à un allumage manqué (on obtient pratiquement la solution stationnaire Euler non brûlée).

Une autre étude, portant sur la simulation d'écoulements à l'équilibre chimique, a également été abordée [15] pour deux codes aérodynamiques industriels. Dans une première approche en éléments finis triangulaires, la méthode de résolution des équations de Navier-Stokes est fondée sur une formulation symétrique en variables entropiques. La deuxième approche fait intervenir la forme et les variables conservatives. L'équilibre chimique est déterminé pour un mélange de gaz divariant. Le système algébrique lié à l'équilibre chimique porte sur l'égalité des enthalpies libres g et est résolu par une méthode de Newton. La méthode de Newton est initialisée grâce à des tables thermochimiques préalablement déterminées. Dans le premier cas, on détermine les fractions massiques et la pression à partir de la température et du potentiel chimique μ . Dans l'autre approche, c'est la température et les fractions massiques qui sont déduites de la connaissance de l'énergie interne et de la masse volumique. Bien que ces travaux soient reliés à l'étude des écoulement supersoniques réactifs, ils nous ont paru un peu trop éloignés du reste de la thèse et n'y sont donc pas inclus.

Le deuxième volet de l'étude a été menée chez Dassault Aviation à Saint-Cloud. Son contexte se situe dans l'étude du mélange turbulent et de l'allumage des gaz lors de l'interaction turbulente de deux jets supersoniques parallèles combustible et comburant. Ce type de configurations peut se retrouver au niveau de l'injection du carburant dans l'écoulement d'air. Cette partie utilise une approche implicite linéarisée en volumes finis structurés pour la résolution des équations de Navier-Stokes bidimensionnelles laminares, incluant les phénomènes de cinétique chimique et le transport diffusif des espèces et de la chaleur. Pour les effets liés à la turbulence, un modèle à deux équations de type $k - \epsilon$ est joint aux équations laminares. Les équations de conservation et les deux équations du modèle $k - \epsilon$ sont traitées de façon successives et donc découplées. Pour une toute première approche de la prise en compte des

effets de la turbulence sur les termes sources chimiques, un modèle de densité de probabilité présumée en température est utilisé. Dans le contexte d’une étude industrielle amont, l’introduction et la comparaison d’autres modèles, parfois plus élaborés, comme le modèle “Peul” [20], le “linear eddy model” [18], le modèle de flammelettes cohérentes [19, 16], ou encore le modèle Bray-Moss-Libby [17], semble une perspective intéressante.

La deuxième partie est constituée de quatre chapitres. Le chapitre quatre décrit le schéma à variation totale décroissante utilisé pour la résolution des équations laminares [24] ainsi que l’approche linéarisée. Le traitement spécifique des termes sources chimiques est également précisé. La stratégie employée [23] consiste en une limitation locale du terme source et de son jacobien en vue de conserver aux matrices jacobiennes intervenant dans l’inversion du système linéaire la même propriété stabilisante de positivité des valeurs propres. Le cinquième chapitre expose quant à lui les équations du modèle $k - \epsilon$, et le schéma numérique employé pour transporter les grandeurs k et ϵ , tout en préservant la positivité.

Le chapitre six est constitué de quelques essais numériques préliminaires, effectués pour valider les codes en cours de développement. Les calculs envisagés sont tout à fait académiques. On détermine en particulier les coefficients de frottements le long d’une plaque plane à Mach 2, pour un écoulement laminaire puis turbulent. On détermine également, de façon analytique puis numérique, la répartition des fractions massiques dans une couche de diffusion, afin de tester l’implication des termes de diffusion de masse. Les calculs sont menés pour une géométrie plane puis axisymétrique. Finalement, on effectue des comparaisons avec des résultats expérimentaux pour le taux d’ouverture de couches de mélange turbulentes compressibles.

Dans le chapitre sept est enfin abordé le problème de l’influence de la turbulence sur le déroulement de la réaction chimique. Des calculs sont effectués pour une couche de mélange compressible air-hydrogène [22], d’abord inerte puis réactive, avec ou sans modèle de densité de probabilité. On compare les résultats obtenus avec ceux de [22], ainsi que ceux de l’expérience de combustion supersonique de Burrows et Kurkov [26].

Les deux volets abordés dans ces deux parties constituent des études de bases en théorie de la combustion dans les superstatoréacteurs et visent à essayer de comprendre plus précisément la nature des écoulements complexes qui interviennent au sein du superstatoréacteur. Les facettes à la fois industrielles et scientifiques du sujet le relient aux récentes études relatives au Programme de REcherches sur la Propulsion Hypersonique Avancée (PREPHA). L’intégration et le développement des deux aspects décrits ci-dessus pourra conduire à un outil numérique de conception d’un système propulsif d’avion supersonique.

Bibliographie

- [1] M.E. White, J.P. Drummond & A. Kumar, *Evolution and application of CFD techniques for scramjet engine analysis*, Jet Prop., **3**, 5, pp. 423-39, (1987).
- [2] M. Barrère & A. Mestré, *Stabilisation de la flamme en combustion supersonique*, La Recherche Aéronautique, **1**, p.1-13, (1988).
- [3] P. Gastebois, *Contribution à l'étude des combustions stabilisées sur ondes de chocs* Thèse de docteur-ingénieur, Université de Paris, (1969).
- [4] P. Deufhard, E. Hairer & J. Zugck, *One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems*, Num. Math., **51**, pp. 501-516, (1987).
- [5] A. C. Hindmarsh, *ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers*, IMACS Trans. on Sc. Comp., Stepleman et al. eds., pp. 55-64, North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [6] M. D. Smooke & V. Giovangigli, *Numerical modeling of axisymmetric laminar diffusion flames*, Impact Comput. Sci. Eng. **4**, pp. 46-79, (1992).
- [7] P. Deufhard, *A modified Newton method for the solution of ill-conditioned systems of nonlinear equations with applications to multiple shooting*, Num. Math., **22**, pp. 289-315, (1974).
- [8] V. Giovangigli & M. D. Smooke, *Adaptive continuation algorithms with application to combustion problems*, Appl. Num. Math., **5**, pp. 305-331, (1989).
- [9] C. C. Douglas & A. Ern, *Numerical solution of flame sheet problems with and without multigrid methods*, Sixth Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, pp. 143-157, Melson Manteuffel & McCormick eds., NASA, Hampton, (1993).
- [10] A. Ern, *Vorticity-velocity modeling of chemically reacting flows*, Ph. D. Thesis, Mech. Eng. Dpt., Yale University, (1994).
- [11] A. Ern & M. D. Smooke, *Vorticity-velocity formulation for three-dimensional steady compressible flows*, J. Comp. Phys., **105**, pp. 58-71, (1993).

- [12] D. Thévenin, *Dynamique de l'allumage des flammes de diffusion dans des écoulements cisailés*, Thèse de l'Ecole Centrale de Paris, p.143 (1992).
- [13] M. Baum, T. Poinso & D. Haworth, *Using direct numerical simulation to study $H_2 - O_2$ flames with complex chemistry in turbulent flows*, soumis au Journ. of Comp. Phys., (1993).
- [14] J. A. Désidéri, N. Glinisky & E. Hettena, *Hypersonic reactive flow computation*, Comp. Fluids, **18**, (2), pp. 151-182, (1990).
- [15] F. Chalot, Y. D'Angelo, M. Mallet, *Simulation numérique d'écoulements visqueux à l'équilibre chimique*, Rev. Sc. Tec. Arm., à paraître.
- [16] S. Candel, D. Veynante, F. Lacas, E. Maistret, N. Darabiha & T. Poinso, *Coherent Flame Model: applications and recent extensions*, Recent Advances in Comb. Modelling, B. Larroturou Ed., World Scientific, (1989).
- [17] K.N.C. Bray, P.A. Libby & J.B Moss, *Flamelet crossing frequencies and mean reaction rates in premixed turbulent combustion*, Comb. Sc. Tech., **41**, pp. 143-72, (1984).
- [18] A.R. Kerstein, *Linear Eddy Model of turbulent scalar transport and mixing*, Comb. Sc. Tech., **60**, pp. 391-405, (1991).
- [19] F.E. Marble & J.E. Broadwell, *The coherent flame model for turbulent chemical reactions*, Project Squid Tech. Rep. TRW-9-PU, Purdue University, (1977).
- [20] R. Borghi, *Turbulent Combustion Modelling*, Prog. En. Comb. Sc., **14**, (1988).
- [21] N. Maman & B. Larroturou, *Dynamical mesh adaption for two-dimensional reactive flow simulations*, Numerical grid generation in computational fluid mechanics and related fields, pp. 13-26, Arcilla Häuser Eiseman Thompson eds., North-Holland, Amsterdam, (1991).
- [22] R.L. Gaffney, Jr., J.A. White, S.S. Girimaji & J.P. Drummond, *Modeling turbulent/chemistry interactions using assumed Pdf methods*, AIAA 92-3638, 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit, Nashville, (1992).
- [23] S. Piperno, "Accélération d'un code 2D-volumes finis structurés résolvant les équations de Navier-Stokes pour un fluide multi-espèces réactif par un schéma implicite linéarisé", Rapport interne Dassault Aviation, Note DEA 9515, (1991).
- [24] P. Rostand, "A prospective study of supersonic combustion", Analatom Inc, Contracr Report 42F01237, (1990).

- [25] R.W. Mc Cormack, G.V. Candler, "The solution of the Navier-Stokes equations using Gauss-Seidel line relaxation", *Comp. and fluids*, **17**, 1, pp. 135-50, (1989).
- [26] M.C. Burrows & A.P. Kurkov, "Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Stream", NASA TM X-2827, (1973).

Première partie

**FLAMMES LAMINAIRES
PRÉMÉLANGÉES**

L'objet de cette partie est l'étude numérique de la stabilisation d'une flamme laminaire air-hydrogène de prémélange à l'aval d'une structure d'ondes de chocs. Le premier chapitre constitue une étude phénoménologique pour le type de configuration étudiée, conduisant à l'effet de Mach. Le deuxième chapitre montre, à travers l'analyse de quelques schémas, les difficultés numériques inhérentes aux cinétiques rapides et fortement exothermiques. Le troisième chapitre présente une méthode à pas fractionnaires pour les simulations multi-dimensionnelles, employant un solveur de Riemann explicite pour le fluide et un solveur de systèmes algébro-différentiels spécifique pour la chimie. La méthode permet de simuler des écoulements instationnaires ou stationnaires, dans des configurations semblables à celles du chapitre 1, et dont nous présentons quelques résultats. Ces travaux ont été menés au CERMICS, à Sophia-Antipolis.

Résumés en français des chapitres 2 et 3

Dans le chapitre 2, on s'intéresse à la résolution par des méthodes de volumes finis décentrées des équations d'Euler multi-dimensionnelles et multi-espèces, comportant en outre des termes sources chimiques. Nous concentrons sur le traitement des termes de réaction, nous comparons pour deux chimies air-hydrogène l'efficacité numérique de schémas implicites, linéarisés ou non, avec plusieurs formulations qui couplent ou découplent partiellement la température et les fractions massiques; nous utilisons également deux solveurs spécialisés, LSODE et DASSL. Les schémas implicites s'avèrent très instables, voire inconditionnellement instables pour certaines conditions initiales. En analysant ensuite quelques modèles simplifiés, nous expliquons ces instabilités. En particulier, nous montrons pourquoi les méthodes implicites linéarisées, qui s'avèrent efficaces pour des chimies complexes globalement endothermiques, souffrent dans le cas de chimies exothermiques de conditions de stabilité qui peuvent même être plus sévères que celle d'un schéma explicite.

Au chapitre 3, on présente une méthode à pas fractionnaires en vue de la résolution du système [Euler + cinétique chimique]. Le modèle de chimie air-hydrogène est complexe et modulaire, les grandeurs thermodynamiques sont évaluées par des approximations polynomiales en température. Le système d'advection pure est résolu grâce à l'utilisation de solveurs de Riemann explicites pour des mélanges multi-espèces. Le 2^{ème} ordre est atteint par la méthode MUSCL. Les termes sources sont intégrés temporellement par un solveur spécialisé (LIMEX ou LSODE). On présente pour terminer des résultats de calculs 2D pour un mélange supersonique d'air et d' H_2 pour des géométries de type rampes ou rampes arrondies. On espère observer dans ce type de configuration la réflexion de Mach des chocs obliques produits et l'allumage du mélange. Le comportement est cependant très fortement lié aux conditions opératoires et l'on peut alors observer des instabilités de l'allumage.

Chapitre 1

Etude phénoménologique de l'effet de Mach

Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet d'une soumission à la revue *La Recherche Aérospatiale*, sous le titre "Analyse de l'allumage d'un mélange air-hydrogène à l'aval d'un système stationnaire d'ondes de chocs".

1.1 Introduction

Le domaine de la simulation de la combustion à grand nombre de Mach a surtout connu ses heures de gloire jusque vers la fin des années 1960. Comme pour bien d'autres sujets de recherches, les investigations numériques ont alors cessé d'être conduites plus avant, faute de moyens informatiques et d'outils algorithmiques suffisamment performants. Toutefois, depuis une quinzaine d'années, il semble que l'on accorde un intérêt renouvelé aux écoulements de fluides compressibles réactifs à grand nombre de Mach. Leur étude est rendue plus accessible du fait des progrès relativement récents et spectaculaires, simultanément des machines et des méthodes [1]. Plus particulièrement, on peut maintenant s'intéresser de façon plus précise à l'étude des statoréacteurs à combustion supersonique (supersonic combustion ramjet ou scramjet dans la littérature anglosaxonne), capables d'assurer la propulsion aérobie d'un avion hypersonique dans la haute atmosphère.

Pour des nombres de Mach de vol supérieurs à 5 ou 6, la combustion supersonique peut s'avérer être une solution plus performante que la combustion subsonique [2, 4]. Dans une telle situation, une manière de stabiliser la flamme peut consister à faire apparaître et à maintenir au sein de l'écoulement prémélangé une structure d'ondes de choc, comportant une région suffisamment chaude et étendue, afin de permettre l'allumage du mélange gazeux dans de bonnes conditions [3]. Un moyen simple d'obtenir une telle configuration consiste à exploiter l'interaction de deux ondes de choc obliques. Sous certaines conditions, leur coalescence peut donner naissance à une portion plus ou moins étendue d'onde de choc quasi-droite – qui

peut ne se réduire qu'à un simple point chaud. La présence du choc quasi-droit, donc fort, permet d'élever brutalement la température locale à l'aval du système d'ondes. Au bout d'une distance d'induction D_i , correspondant à un temps d'induction $\tau_i = \int_0^{D_i} 1/v(s) ds$, où $v(s)$ est le module de la vitesse locale du fluide, fonction de l'abscisse s en aval du choc, une inflammation spontanée peut ainsi prendre naissance. La combustion est stabilisée par l'apport continu de nouveau mélange frais.

Le phénomène s'apparente ainsi aux détonations qui se propagent à des vitesses supersoniques et se composent d'une onde de choc suivie d'une onde de combustion. Toutefois, une différence essentielle entre la combustion à l'aval d'une telle structure et une détonation classique, est que cette première ne s'effectue pas selon une hypothèse de tranches planes, puisque le choc droit est loin d'occuper toute la section du conduit. On ne peut retrouver alors les conditions de Chapman-Jouguet que localement, à l'aval de la portion droite du choc. Par interaction des couches périphériques rapides, situées à l'aval des chocs obliques, sur les couches internes plus lentes, à l'aval du choc quasi-droit, l'écoulement peut redevenir globalement supersonique en aval de la combustion, ce qui a pour conséquence de rendre cette configuration a priori très intéressante. Une autre différence est que les détonations classiques se propagent à une vitesse définie, alors que l'on espère stabiliser ce type de combustion supersonique pour une gamme relativement étendue de nombres de Mach.

Dans le cas de l'écoulement d'un gaz caloriquement parfait, et en l'absence de combustion, la référence [10] fournit l'étude analytique classique de ce type de configuration. On peut y trouver la détermination des polaires de chocs ainsi que la discussion d'une réflexion "normale" ou de l'apparition de l'effet de Mach. Dans ce chapitre, on étend ces résultats dans les cas où le mélange gazeux peut réagir chimiquement, et où la loi d'état de l'énergie interne prend une forme plus réaliste. On effectue l'analyse des polaires de chocs dans le cas caloriquement parfait avec combustion. On détermine les réflexions multiples possibles et l'apparition de l'effet de Mach lorsque les enthalpies sont des fonctions polynomiales de la température.

Cette étude préliminaire est ainsi destinée à déterminer les conditions d'apparition de l'effet de Mach, ainsi qu'à estimer les distances locales d'induction avant la flamme, pour dimensionner des essais numériques bidimensionnels ultérieurs.

1.2 Modèle et systèmes d'équations

Lorsqu'un écoulement supersonique rencontre un obstacle telle qu'une rampe, le changement brutal de direction de la vitesse ne peut s'effectuer continûment. Ceci va conduire à l'apparition d'une onde de choc oblique. Dans le cas d'un écoulement stationnaire bidimensionnel régi par les équations d'Euler, on peut supposer que la solution est composée de deux états constants, séparés par une onde de choc oblique plane permettant le passage de l'état amont à l'état aval. Ces deux hypothèses [planéité de l'onde de choc] et [existence de seule-

ment deux états constants] sont toujours valides si l'on se place dans une région suffisamment petite au niveau du choc.

Remarque 1 : Si l'on suppose que le gaz peut réagir chimiquement, l'angle du choc sera modifié par le dégagement de chaleur derrière le choc. Toutefois, si la température aval n'est pas assez élevée, la réaction ne sera pas "instantanée" et l'hypothèse d'état aval constant, correspondant à l'équilibre chimique final, sera vérifiée non plus juste derrière le choc, mais après une distance macroscopique de l'ordre de D_i . Cependant, on peut s'attendre à ce que la combustion modifie l'angle du choc seulement puisque les "informations" qu'elle produit peuvent remonter l'écoulement. En effet, l'écoulement aval admet une vitesse normale au choc "globalement" subsonique avant le début de la combustion; cette propriété est bien connue dans le cas simplifié d'un gaz caloriquement parfait sans combustion. Dans toute la suite, on appellera gaz caloriquement parfait un gaz qui obéit à la loi des gaz parfaits (1.3) ci-après et dont l'enthalpie est une fonction affine de la température.

Si la combustion peut effectivement prendre naissance à l'aval du choc avant que l'écoulement ne devienne plus complexe, l'angle du choc sera donné par les équations avec l'état aval brûlé. Lorsque le mélange ne s'enflamme pas du tout, ou seulement de façon partielle, l'angle du choc sera donné par les équations comportant un état aval inerte ou incomplètement brûlé. •

1.2.1 Relations pour les chocs obliques stationnaires

Les conditions de saut peuvent bien sûr directement être déduites des principes physiques de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Désignons par ε l'angle du choc avec la direction du vecteur vitesse amont et δ l'angle de déflexion, c'est-à-dire l'angle entre les directions des vecteurs vitesse amont et aval. *On supposera dans toute la suite que les angles ε et δ sont tout deux compris entre 0 et 90 degrés.* L'indice 0 (resp. 1) se rapporte aux grandeurs relatives à l'écoulement amont (resp. aval). Les indices t et n se rapportent aux projections sur les directions normale et tangentielle au choc. On notera v les vitesses, P les pressions, ρ les masses volumiques et h les enthalpies massiques.

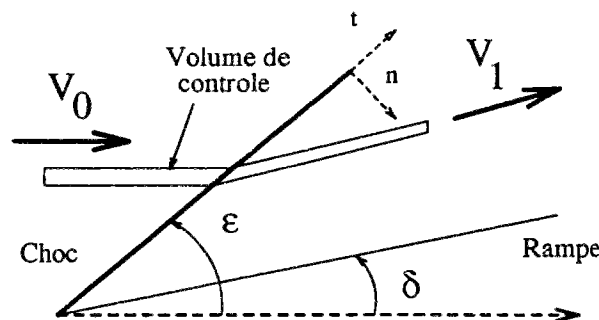


FIG. 1.1 - Volume de contrôle

Après avoir précisé ces notations, on peut maintenant intégrer les équations de conservation

sur le volume de contrôle de la figure 1.1. Le système qui en résulte est le suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_0 v_{n0} = \rho_1 v_{n1} \\ P_0 + \rho_0 v_{n0}^2 = P_1 + \rho_1 v_{n1}^2 \\ \rho_0 v_{n0} v_{t0} = \rho_1 v_{n1} v_{t1} \\ h_0 + \frac{1}{2} v_0^2 = h_1 + \frac{1}{2} v_1^2 \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Remarque 2 : Les trois premières équations sont valides du seul fait des lois de la mécanique. Le modèle thermodynamique pour le fluide n'intervient qu'au niveau de l'équation de l'énergie, en fournissant une relation entre la pression et l'enthalpie. •

Remarque 3 : A partir du système (1.1), il est immédiat de constater que $v_{t0} = v_{t1}$. On remarque alors que tout se passe comme si la vitesse normale subissait un choc droit – ce qui, comme il a déjà été dit dans une précédente remarque, est un résultat bien connu dans le cas caloriquement parfait. Puisqu'alors $v_{n0} > v_{n1}$ (v_{n0} supersonique et v_{n1} subsonique), l'écoulement aval sera défléchi vers l'onde de choc oblique, soit avec nos notations $\delta < \varepsilon$. On admettra que cette dernière inégalité est valable même si le mélange gazeux n'est plus caloriquement parfait et peut réagir chimiquement. •

On peut en outre écrire les relations géométriques suivantes pour les vitesses : $v_0^2 = v_{n0}^2 + v_{t0}^2$, $v_1^2 = v_{n1}^2 + v_{t1}^2$, $v_{t0} = v_0 \cos \varepsilon$, $v_{n0} = v_0 \sin \varepsilon$, $v_{t1} = v_1 \cos (\varepsilon - \delta)$, $v_{n1} = v_1 \sin (\varepsilon - \delta)$. Compte tenu de ces relations, et après quelques simplifications, le système (1.1) peut alors s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{ll} v_0 \cos \varepsilon = v_1 \cos (\varepsilon - \delta) & (i) \\ \rho_0 v_0 \sin \varepsilon = \rho_1 v_1 \sin (\varepsilon - \delta) & (ii) \\ P_0 + \rho_0 v_0^2 \sin^2 \varepsilon = P_1 + \rho_1 v_1^2 \sin^2 (\varepsilon - \delta) & (iii) \\ h_0 + \frac{1}{2} v_0^2 = h_1 + \frac{1}{2} v_1^2 & (iv) \end{array} \right. \quad (1.2)$$

Remarque 4 : Un angle $\delta = \delta'$ négatif correspondrait au cas de la figure 1.2, où l'état connu $0 = 1'$ est l'état aval et où l'on cherche l'état amont $1 = 0'$ correspondant. L'angle du choc ε' est alors égal à $\varepsilon - \delta$. Les équations du système (1.1) sont encore valables, puisque les relations géométriques sur les vitesses demeurent les mêmes. L'état amont $0' = 1$ doit être a priori choisi non brûlé, sauf s'il correspond déjà à un état aval brûlé d'un précédent choc, et l'état aval $1' = 0$ peut être brûlé ou non. Pour correspondre à une situation physique, on peut s'attendre intuitivement à ce que l'état aval $0 = 1'$ ne puisse être choisi tout à fait arbitrairement. Toutefois, dans le cadre de l'étude qui nous intéresse – la stabilisation d'une

flamme dans un écoulement supersonique par effet de Mach –, l'analyse de ce cas n'est pas nécessaire. On se limitera donc au cas où l'angle δ est positif. •

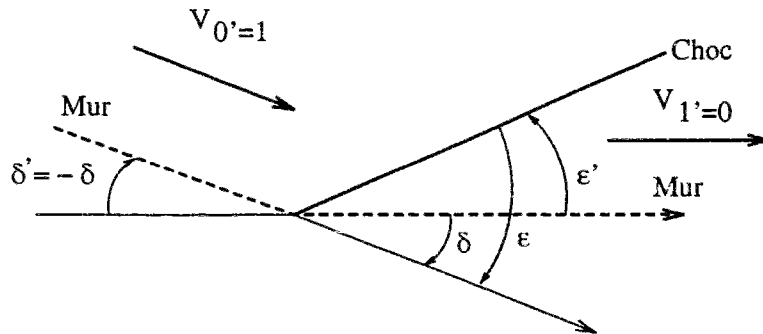


FIG. 1.2 - Configuration avec un angle de déflexion δ négatif

Afin de fermer le système (1.2), on a d'une part besoin de la relation liant la pression aux autres grandeurs thermodynamiques, et d'autre part de la relation permettant de déterminer l'enthalpie du mélange. Pour la pression, nous supposons dans toute la suite que nous avons affaire à un mélange parfait de gaz parfaits qui obéissent à la loi classique:

$$P = \rho \frac{RT}{W} \quad (1.3)$$

où T désigne la température, W la masse molaire moyenne et R la constante des gaz parfaits ($R = 8.31441 \text{ J K}^{-1}$).

Pour l'enthalpie, nous envisagerons deux cas : d'une part, le cas où les capacités calorifiques sont constantes de part et d'autre du choc, et d'autre part, le cas où elles dépendent de la température. Ce deuxième modèle thermodynamique sera décrit dans la partie 1.3.2. La résolution de ce dernier système sera effectuée dans la partie 1.2.4.

Remarque 5 : Le système d'équations (1.1) est identique à celui que l'on peut écrire pour résoudre l'écoulement correspondant à une onde de combustion dans un mélange gazeux sans effet de viscosité ou de transport. La vitesse v_{n0} correspond à la vitesse de l'onde par rapport aux gaz frais. Pour un gaz caloriquement parfait, on connaît les deux types d'ondes pouvant se propager : suivant les conditions aux limites, se forme ou bien d'une déflagration, où l'onde de combustion est subsonique, ou bien d'une détonation, où l'onde de combustion est supersonique [10]. •

Remarque 6 : De façon générale, et en particulier lorsque le mélange aval au choc s'enflamme, l'état aval n'est pas uniforme. Les lignes de courant ne seront plus nécessairement des droites derrière le choc. Le système (1.1) reste toujours valable à condition de choisir le volume de contrôle de la figure 1.1 comme un tube de courant, qui peut être courbe. •

1.2.2 Résolution pour un mélange caloriquement parfait

Dans cette partie, nous allons ramener la résolution du système (1.2) à la recherche des racines d'un polynôme, dans le cas où les enthalpies sont données par des relations affines en température :

$$h_i = c_{pi}T + h_i^0, \quad (1.4)$$

pour $i = 1, 2$. Les c_{pi} et les h_i^0 sont respectivement les capacités calorifiques à pression constante et les enthalpies massiques de formation du mélange pour les état amont 1 et aval 2. Les c_{pi} sont supposées constantes pour chacun des états amont et aval et égales à :

$$c_{pi} = \frac{\gamma_i}{\gamma_i - 1} \frac{R}{W_i}. \quad (1.5)$$

Les γ_i sont les rapports, constants et strictement supérieurs à 1 pour chaque état, des capacités calorifiques à pression et volume constants. Ces hypothèses correspondent bien au cas d'un gaz caloriquement parfait.

Nous allons commencer par déduire de (1.2) les relations qui seront valables dans toute la suite. Des deux premières équations (1.2.i) et (1.2.ii), on déduit :

$$\rho_1 = \frac{\tan \varepsilon}{\tan(\varepsilon - \delta)} \rho_0, \quad (1.6)$$

et

$$v_1 = \frac{\cos \varepsilon}{\cos(\varepsilon - \delta)} v_0. \quad (1.7)$$

De (1.2.iii), (1.6), (1.7), on déduit pour T_1 , après un peu de trigonométrie :

$$T_1 = \frac{W_1}{W_0} \left(T_0 + v_0^2 \frac{x^2}{1+x^2} \right) \frac{x-\alpha}{x(1+\alpha x)} - \frac{W_1 v_0^2}{R} \frac{(x-\alpha)^2}{(1+x^2)(1+\alpha x)^2}, \quad (1.8)$$

avec $x = \tan \varepsilon \geq 0$ et $\alpha = \tan \delta \geq 0$.

De l'équation d'énergie (1.2.iv), et avec les enthalpies affines en température, il vient une autre expression pour T_1 :

$$T_1 = \frac{1}{c_{p1}} \left[c_{p0} T_0 - \Delta h_0 + \frac{1}{2} v_0^2 \left(\frac{1 + \left(\frac{x-\alpha}{1+\alpha x} \right)^2}{1+x^2} \right) - 1 \right], \quad (1.9)$$

avec $\Delta h_0 = h_1^0 - h_0^0$. Si Δh_0 est non nul, cela signifie que l'état aval correspond à un état partiellement ou complètement brûlé. On envisagera les cas où l'état 2 est ou bien figé (pas de combustion : $\Delta h_0 = 0$), ou bien complètement brûlé ($\Delta h_0 < 0$, réaction exothermique).

En rapprochant ces deux expressions (1.8) et (1.9) de T_1 et en réduisant au même dénominateur, il vient, tous calculs faits, l'équation polynomiale en $x = \tan \varepsilon$ et $\alpha = \tan \delta$:

$$P(x, \alpha) = \alpha^2 (x^3(c+d) + x(b-d-a)) + \alpha (x^2(a-b+2c+2d) - a) + x(a+c) = 0 \quad (1.10)$$

avec : $a = -\frac{RT_0}{W_0}$, $b = v_0^2$, $c = \frac{R}{c_{p1}W_1}(c_{p0}T_0 - \Delta h_0)$, $d = \frac{1}{2} \frac{Rv_0^2}{c_{p1}W_1}$.

Remarque 7 : Si $a + c$ est nul (i.e. lorsque par exemple $W_0c_{p0} = W_1c_{p1}$ et $\Delta h_0 = 0$), le polynôme $P(x, \alpha)$ donné par (1.10) n'est alors plus que du premier degré en α . Numériquement, nous avons effectivement choisi $c_{p0} = c_{p1}$ pour le cas sans combustion. Puisqu'alors $W_0 = W_1$ (une seule composition chimique est présente), cela conduit à C nul pour le cas $\Delta h_0 = 0$. •

1.2.3 Discussion du cas caloriquement parfait

Le polynôme $P(x, \alpha)$ est de degré 3 en x et de degré 2 en α , d'après (1.10). C'est pourquoi, nous allons mener la discussion en supposant que l'on cherche δ (et donc α) correspondant à un angle ε donné (et donc à un x donné). Notons donc, d'après (1.10) :

$$P(x, \alpha) = P_x(\alpha) = A\alpha^2 + B\alpha + C \quad (1.11)$$

et

$$\Delta h_0 = -\frac{R\vartheta}{W_1}Y_C \quad (1.12)$$

où ϑ est une constante positive homogène à une température, et Y_C désigne la fraction massique de combustible ayant brûlé. Nous allons nous placer dans le cas où la réaction globale est "suffisamment exothermique"; plus précisément, nous supposons que :

$$-\Delta h_0 > c_{p0}T_0 \left(-1 + \frac{c_{p1}W_1}{c_{p0}W_0} \right) \quad (1.13)$$

La condition (1.13) n'est en fait pas très contraignante, puisque $\frac{c_{p1}W_1}{c_{p0}W_0}$ est proche de l'unité; elle sera effectivement vérifiée lors de nos calculs numériques. Pour la suite de notre discussion et pour fixer les idées, nous ferons en outre l'hypothèse technique suivante, qui n'est ni minimale ni contraignante :

$$\frac{1}{2} < \frac{c_{p0}W_0}{c_{p1}W_1} < 2. \quad (1.14)$$

On peut alors énoncer le :

Lemme 1 : *Sous la condition (1.13), le terme constant $C = x(a + c)$ de P_x est positif.*

Preuve : x étant supposé positif, le signe de C est celui de $a + c$, dont l'expression est $a + c = \frac{R}{c_{p1}W_1} \left[c_{p0}T_0 \left(1 - \frac{c_{p1}W_1}{c_{p0}W_0} \right) - \Delta h_0 \right]$. Le résultat découle alors directement de l'hypothèse (1.13). •

Pour les coefficients A et B , on peut également énoncer les deux lemmes suivants :

Lemme 2 : *Le coefficient A du terme en α^2 de P_x est positif.*

Preuve: L'expression de A est $x^3(c + d) + x(b - d - a)$. Or $-a$, c et d sont positifs; il suffit donc de vérifier que $b - d$ l'est. Puisque $\frac{1}{2} \frac{R}{c_{p1} W_1} = \frac{1}{2} \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1}$ et que $\gamma_1 > 0$, il vient que $b - d = v_0^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1}\right) = \frac{\gamma_1 + 1}{2\gamma_1} v_0^2 > 0$. •

Lemme 3: *Il existe une constante positive K telle que si :*

$$\frac{W_0}{\gamma_1 R T_0} v_0^2 > K + \frac{1}{x^2}, \quad (1.15)$$

alors le coefficient B du terme en α de P_x est négatif.

Preuve: La démonstration est immédiate et découle directement de l'expression de $B = x^2(a - b + 2c + 2d) - a$. On trouve, en imposant $B > 0$, que :

$$K = \frac{2\vartheta Y_C(\gamma_1 - 1)}{\gamma_1 T_0} \frac{W_0}{W_1} + 2 \frac{c_{p0} W_0}{c_{p1} W_1} - 1 \quad (1.16)$$

expression positive strictement, grâce à (1.14). •

Sous les hypothèses (1.13), (1.14), et aussi la condition (1.15) du lemme 3, on déduit alors que lorsque P_x admet deux racines réelles, elles sont de même signe positif. Les conditions (1.13) et (1.14) sont facilement réalisables pour un mélange donné (elles ne dépendent que des proportions relatives des constituants du gaz et de leur nature thermodynamique). La condition (1.15) du lemme 3 s'écrit aussi:

$$M_0^2 \geq \frac{\gamma_1}{\gamma_0} \left(K + \frac{1}{x^2} \right) \quad (1.17)$$

où M_0 désigne le nombre de Mach amont.

Sous les conditions (1.13) et (1.14), si (1.17) n'est pas vérifiée, B est positif et P_x n'admet pas de racines positives. (1.17) donne alors une condition nécessaire d'existence d'une racine positive pour P_x . On peut alors énoncer la proposition :

Proposition 4: *Sous les hypothèses (1.13) et (1.14), les deux conditions nécessaires et suffisantes d'existence d'une racine positive pour P_x sont:*

- *Condition de positivité: le nombre de Mach amont M_0 vérifie (1.17) ,*
- *Condition de réalité: le discriminant de P_x est positif, ce qui conduit à une inégalité de la forme:*

$$\Xi(x^2) = \xi_4 x^4 - 2\xi_2 x^2 + 1 \geq 0. \quad (1.18)$$

La condition (1.18) découle directement du calcul du discriminant. Les coefficients ξ_i n'ont pas des expressions simples (cf. ci-dessous). La conséquence essentielle de cette proposition est le théorème :

Théorème 5 : *Sous les hypothèses (1.13) et (1.14), il existe une constante $M^* > 0$ telle que :*

- *si le nombre de Mach amont M_0 est inférieur à M^* , le polynôme P_x n'a pas de racine positive,*
- *si $M_0 > M^*$, il existe un angle de choc minimal ε_{min} tel que :*
 - *pour $\varepsilon < \varepsilon_{min}$, le polynôme P_x n'admet pas de racine positive,*
 - *pour $\varepsilon > \varepsilon_{min}$, le polynôme P_x admet deux racines positives.*

Preuve : Il faut expliciter les coefficients ξ_i de (1.18). On peut d'abord donner les expressions des coefficients A, B, C de P_x . Après calculs et simplifications, il vient :

$$\begin{cases} A = \frac{RT_0}{W_0}x(\lambda x^2 + \mu) \\ B = \frac{RT_0}{W_0}(1 - \nu x^2) \\ C = \frac{RT_0}{W_0}x\zeta \end{cases} \quad (1.19)$$

où λ, μ, ν, ζ sont des constantes **positives** (sous nos hypothèses), données par :

$$\begin{cases} \lambda = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} + \frac{\gamma_0}{2} M_0^2 + \frac{\vartheta Y_C W_0}{T_0 W_1} \right) = \frac{K + 1}{2} + \frac{\gamma_0(\gamma_1 - 1)}{2\gamma_1} M_0^2 \\ \mu = \frac{\gamma_1 + 1}{2} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} M_0^2 + 1 \\ \nu = 1 + \frac{\gamma_0}{\gamma_1} M_0^2 - 2 \frac{\gamma_0(\gamma_1 - 1)}{\gamma_1(\gamma_0 - 1)} - 2 \frac{\vartheta Y_C W_0}{T_0 W_1} \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} = \frac{\gamma_0}{\gamma_1} M_0^2 - K \\ \zeta = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} \left(\frac{\vartheta Y_C W_0}{T_0 W_1} + \frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} - \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \right) = \frac{1}{2}(K - 1) \end{cases} \quad (1.20)$$

La positivité du discriminant de P_x s'écrit alors selon (1.18), avec $\Xi(s) = \xi_4 s^2 - 2\xi_2 s + 1$ et :

$$\begin{cases} \xi_4 = \nu^2 - 4\zeta\lambda \\ \xi_2 = \nu + 2\mu\zeta \end{cases} \quad (1.21)$$

Le polynôme $\Xi(x^2)$ admet donc deux racines réelles, puisque son discriminant réduit, égal à $\xi_2^2 - \xi_4 = 4(\mu^2\zeta^2 + \nu\mu\zeta + \zeta\lambda)$, est strictement positif. Puisque ξ_2 est positif, le signe du produit et de la somme de ces deux racines est identique et égal au signe de ξ_4 . Si l'on note $X = \frac{\gamma_0}{\gamma_1} M_0^2$, il vient que ξ_4 peut s'écrire :

$$\xi_4 = (X - K)^2 - (K - 1)(K + 1 + (\gamma_1 - 1)X) = X^2 - X(2K + (\gamma_1 - 1)(K - 1)) + 1 \quad (1.22)$$

D'après (1.19), (1.20), et le lemme 1, K est alors > 1 . Le discriminant du polynôme en X donné par (1.22) est égal à :

$4(K^2 - 1) + (\gamma_1 - 1)(K - 1)(4K + (\gamma_1 - 1)(K - 1))$ et est donc positif. Soient X_1 et X_2 les deux racines correspondantes. On a $X_1 X_2 = 1$ et $X_1 + X_2 = 2K + (\gamma_1 - 1)(K - 1) > 2K > 0$. X_1 et X_2 sont donc positives et si l'on prend $X_2 \geq X_1$, il vient que $X_2 > K > 1 > X_1$.

D'après la condition (1.17), on sait que X doit être plus grand que K . Alors il existe une valeur X_2 telle que, si $K < X < X_2$, alors ξ_4 est négatif et si $X > X_2$, ξ_4 est positif.

Lorsque ξ_4 est négatif, $\Xi(x^2)$ admet une racine positive et une négative. Il existe donc une seule valeur $x = x'$ positive annulant $\Xi(x^2)$. Pour $x < x'$, la condition (1.18) sera vérifiée. Elle ne le sera plus pour $x > x'$.

Lorsque ξ_4 est positif, $\Xi(x^2)$ admet deux racines positives. Il existe donc deux valeurs x_1 et x_2 positives qui annulent Ξ . Supposons que $x_1 \leq x_2$.

Notons $x_0 = (X - K)^{-\frac{1}{2}}$. La condition (1.17) équivaut à $x > x_0$. Remarquons alors que $\Xi(x_0^2) < 0$. En effet :

$$\Xi(x_0^2)(X - K)^2 = -(K - 1) \left(K + 1 + (\gamma_1 - 1)X + 2(X - K)(1 + \frac{1}{2}(\gamma_1 + 1)X) \right) < 0 .$$

On en conclut que :

- lorsque ξ_4 est négatif , $x_0 > x'$,
- lorsque ξ_4 est positif , $x_1 < x_0 < x_2$.

Ce qui se traduit finalement par :

- lorsque ξ_4 est négatif, les deux conditions (1.17) et (1.18) s'excluent mutuellement et le système (1.2) n'a pas de solution correspondant à un ε positif,
- lorsque ξ_4 est positif, i.e. lorsque le nombre de Mach amont est assez grand ($M_0 > M^* = \sqrt{\frac{\gamma_1}{\gamma_0}} X_2$), la condition (1.18) est plus restrictive que (1.17), et s'écrit $x > x_2$, ce qui achève la preuve. •

Remarque 8 : L'angle ε_{min} est alors bien sûr déterminé par $\varepsilon_{min} = \text{Arctan}(x_2)$. De façon équivalente, cela signifie qu'il existe un angle de déflexion minimal δ_{min} en dessous duquel il n'y a pas de solution en choc oblique "faible". La deuxième solution, correspondant à un choc "fort" dont l'angle ε est proche de $\frac{\pi}{2}$, peut apparaître sous certaines conditions aux limites aval, portant sur la pression. L'existence de ces deux solutions possibles est bien connue dans le cas caloriquement parfait sans combustion, mais la solution en choc fort est rarement observée dans la nature [10]. L'effet de la combustion est donc de faire basculer la solution de "choc oblique faible" à "choc oblique fort". On retrouvera cette propriété lorsque l'on modélisera les enthalpies de façon plus réaliste. •

Examinons brièvement le cas où il n'y pas de combustion. L'analyse peut se faire directement, en revenant à P_x . Puisqu'alors nous supposons que $c_{p0} = c_{p1}$ et $W_0 = W_1$, le terme

constant C de P_x est alors nul. P_x n'admet alors qu'une seule racine non nulle $\alpha_0 = -\frac{B}{A}$. Puisque d'après le lemme 2, A est positif, α_0 sera positif si $B \leq 0$.

D'après le lemme 3, avec $\vartheta = 0$ et $K = 1$, B sera négatif si $v_{n0} = v_0 \sin \varepsilon \geq c_0 = \sqrt{\gamma_0 \frac{RT_0}{W_0}}$. On retrouve que la condition d'apparition de l'onde de choc pour un gaz polytropique inerte est que la vitesse normale au choc soit supersonique.

Continuons maintenant la discussion du cas avec combustion. Si l'on a pu trouver sous certaines conditions deux solutions a priori "physiquement acceptables" (c'est-à-dire positives) pour α , reste à savoir laquelle il faut choisir. En fait, si l'on fait tendre C vers 0 (i.e. si on se rapproche du cas sans combustion), la plus petite des deux solutions de P_x , soit α_1 tend vers 0, puisque B est négatif. La plus grande α_2 tend vers la solution non nulle $\alpha_0 = -\frac{B}{A}$ non nulle du cas sans combustion. On conservera donc cette dernière racine α_2 pour la solution du cas avec combustion, lors des essais numériques du paragraphe 1.5.

Remarque 9 : On peut remarquer que pour un angle du choc ε donné, la tangente α de l'angle δ (et donc l'angle δ) est *inférieure* pour le cas avec combustion. A déflexion égale, l'angle du choc dans le cas avec combustion sera donc plus important. Nous retrouverons aussi ce fait lorsque l'on mènera l'étude numérique avec des enthalpies "réelles". Intuitivement, le dégagement de chaleur supplémentaire à l'aval du choc, dû à la combustion, provoque une augmentation locale du volume et de la pression du mélange. Son effet est ainsi de "repousser" le choc oblique.●

1.2.4 Résolution numérique pour des enthalpies polynomiales

Examinons maintenant le cas plus réaliste où l'énergie interne, et donc l'enthalpie, du mélange gazeux n'est plus simplement une fonction affine de la température. Le système à résoudre peut toujours s'écrire sous la forme du système (1.2). Cette fois, les enthalpies massiques sont des polynômes de degré 5 en température, données par les équations (1.38) et (1.37). Les équations (1.8) et (1.7) qui donnent la température et la vitesse aval en fonction de $x = \tan \varepsilon$ et $\alpha = \tan \delta$ et des grandeurs amont demeurent valables. Lorsqu'on injecte les deux valeurs de T_1 et v_1 dans l'équation de l'énergie (1.2.iv), on obtient, après réduction au même dénominateur un polynôme du vingtième degré en x et du dixième en α . La détermination des coefficients de ce polynôme – noté D_x – a été effectuée de façon informatique à l'aide du logiciel de calcul formel Maple, qui est capable de directement générer des expressions en langage Fortran. Un minimum de calculs algébriques et de codage a ainsi été requis, permettant d'éviter nombre d'erreurs potentielles de calculs et de transcription.

Les degrés élevés des polynômes et la complexité des expressions des coefficients interdisent toute analyse simple. Nous nous sommes donc limités à la résolution numérique sans analyse préalable, mais nous allons constater numériquement que le comportement reste qualitativement identique.

Une première tentative de résolution à l'aide de la méthode de Newton s'est avérée relativement coûteuse. D'une part, parce que la méthode converge avec difficultés et nécessite des valeurs initiales correctement choisies. D'autre part, parce que même en cas de convergence, après avoir fait varier la valeur initiale, la solution trouvée n'est pas forcément celle qui convient, et il faut continuer de faire varier la condition initiale, ce qui augmente le coût global de la méthode. En outre, la transformation du polynôme D_x à l'aide d'un changement de variables, afin d'obtenir localement une fonction convexe, est apparue comme non triviale.

La méthode de dichotomie s'est révélée plus sûre et sensiblement plus rapide, même si elle est plus longue à converger. Pour chaque valeur de ε , donc de x , la seule difficulté consiste alors à trouver un intervalle $[\alpha', \alpha'']$ tel que, si α_0 est la racine de D_x à trouver, on ait :

$$\begin{cases} D_x(\alpha')D_x(\alpha'') < 0 \text{ et} \\ \alpha_0 \text{ est la seule racine de } D_x \text{ dans } [\alpha', \alpha'']. \end{cases} \quad (1.23)$$

Pour ce faire, on détermine d'abord la solution α_2 du polynôme P_x du cas caloriquement parfait. Cette détermination se fait à partir de son expression analytique. On évalue ensuite le signe de $D_x(\alpha_2)$. A partir de α_2 , on évalue les signes de $D_x(\alpha_2 \pm \Delta^n)$, où Δ^n est une suite strictement croissante de termes strictement positifs. En augmentant progressivement la valeur de Δ^n (i.e. en prenant les différents termes de la suite), on espère trouver une première valeur n_0 telle que $D_x(\alpha_2)D_x(\alpha_2 \pm \Delta^{n_0})$ soit négatif. On prend alors :

$$\alpha' = \min(\alpha_2 \pm \Delta^{n_0-1}, \alpha_2 \pm \Delta^{n_0}) \quad (1.24)$$

$$\alpha'' = \max(\alpha_2 \pm \Delta^{n_0-1}, \alpha_2 \pm \Delta^{n_0}) \quad (1.25)$$

On peut ensuite débiter l'algorithme et être "certain" – si $(\Delta^{n_0} - \Delta^{n_0-1})$ est suffisamment petit – de capturer la racine α_0 de D_x la plus proche de α_2 . En pratique, la suite Δ^n est telle que l'accroissement correspondant pour l'angle δ soit égal à une valeur $\Delta > 0$, choisie de façon arbitraire "suffisamment petite", selon :

$$\text{Arctan}(\alpha_2 \pm \Delta^{n+1}) = \text{Arctan}(\alpha_2 \pm \Delta^n) + \Delta \quad (1.26)$$

En pratique, pour les calculs de la section 1.5, on a pris Δ correspondant à un millième de degré pour la première valeur du paramètre ε . Lorsqu'une première racine est captée, on choisit pour les valeurs suivantes de ε , une valeur de Δ égale au dixième de la différence $\|\alpha_2 - \alpha_0\|$ du ε précédent.

Remarque 10 : La méthode de dichotomie présente par rapport à la méthode de Newton l'avantage de conserver l'information relative à la solution α_2 du cas avec enthalpies affines. Plus précisément, la solution α'_0 de la méthode de Newton est souvent obtenue à partir d'une solution initiale très éloignée de α_2 , les itérations initialisées avec α_2 ne fournissant alors pas de solution acceptable. Par dichotomie, on obtiendra d'autant plus rapidement la solution "physique" du problème avec enthalpies polynomiales que la valeur obtenue à l'aide du modèle

simplifiée (avec enthalpies affines) est proche de la valeur recherchée. Le choix des valeurs des grandeurs physiques intervenant dans le modèle simplifié est donc crucial pour l'obtention de la solution correcte et rapide du cas avec enthalpies polynomiales. •

Remarque 11 : Lorsque l'on ne trouve pas de racine, même après diminution du paramètre Δ , qui est en quelque sorte la "maille" du filet sensé capturer les racines, on en conclue qu'il n'y en a pas. Il peut également arriver que l'on capte une racine directement non acceptable (ε inférieur à δ ou encore négatif), ou conduisant indirectement à des grandeurs physiques non acceptables. Au vu des résultats obtenus dans le cas simplifié où les enthalpies sont affines en température (cf. théorème 5), ce fait n'est en rien surprenant. On a simplement déterminé la valeur minimale ε_{min} de façon numérique. •

1.3 Relaxation chimique

Intéressons-nous maintenant à la distance d'induction de la combustion à l'aval du choc. L'évaluation de cette distance peut être utile si l'on cherche par exemple à connaître la longueur d'un domaine de calcul bidimensionnel pour une étude directe de l'allumage de la flamme.

1.3.1 Système d'équations

Le nouveau système à résoudre est composé des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, auxquelles il faut ajouter les équations différentielles d'évolution des κ espèces chimiques composant le mélange gazeux. Ces équations peuvent s'écrire, en régime stationnaire, x désignant l'abscisse le long d'une ligne de courant aval au choc :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dY_k}{dx} = \frac{\Omega_k(T, \mathbf{Y}, \rho)}{\rho u} \\ \rho u = \rho_1 u_1 = \text{cte} \\ P + \rho u^2 = P_1 + \rho_1 u_1^2 = \text{cte} \\ h(T, \mathbf{Y}) + \frac{1}{2}u^2 = h(T_1, \mathbf{Y}_1) + \frac{1}{2}u_1^2 = \text{cte} \end{array} \right. \quad (1.27)$$

où ρ est la masse volumique, P est la pression, u est le module de la vitesse, $\mathbf{Y} = {}^t(Y_1, \dots, Y_\kappa)$ est le vecteur des fractions massiques des κ espèces, $h(T, \mathbf{Y})$ est l'enthalpie du mélange, $\Omega_k(T, \mathbf{Y}, \rho)$ est le terme source chimique pour l'espèce k . La pression se déduit classiquement par la loi de Dalton pour un mélange parfait de gaz parfaits :

$$P = \sum_{k=1}^{\kappa} \rho Y_k \frac{RT}{W_k}, \quad (1.28)$$

où W_k désigne la masse molaire de l'espèce k .

Les valeurs indicées 2 sont les valeurs initiales des grandeurs physiques considérées. Elles sont déterminées à partir des grandeurs amont par les relations (1.6), (1.7), (1.8) et (1.28).

Nous décrivons dans la section suivante 1.3.2 les modèles thermodynamiques et chimiques, permettant de déterminer les enthalpies ainsi que les termes sources. La résolution numérique du système est décrite section 1.3.3.

1.3.2 Modèle thermodynamique réel et modèle d'Arrhenius

La composition du mélange de κ espèces gazeuses est ici gouvernée par l'évolution au cours du temps de I réactions chimiques réversibles, que nous écrivons selon:

$$\sum_{k=1}^{\kappa} \nu'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{\kappa} \nu''_{ki} \chi_k, \quad (1.29)$$

pour $1 \leq i \leq I$. Les termes sources $\omega_k = \frac{dY_k}{dt}$ valent :

$$\omega_k = \sum_{i=1}^I W_k \nu_{ki} \mathcal{R}_i, \quad (1.30)$$

où $\nu_{ki} = (\nu''_{ki} - \nu'_{ki})$, et W_k désigne la masse molaire de l'espèce χ_k , et où \mathcal{R}_i désigne le taux d'avancement de la réaction i .

La vitesse de réaction de la réaction i est alors donné par:

$$\mathcal{R}_i = K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}}, \quad (1.31)$$

où $N_k = \frac{\rho Y_k}{W_k}$ est la densité molaire de l'espèce χ_k . Pour les réactions à trois corps, l'expression pour \mathcal{R}_i est modifiée et vaut :

$$\mathcal{R}_i = B_i (K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}}), \quad (1.32)$$

où $B_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \alpha_{ki} N_k$; les α_{ki} sont les coefficients d'efficacités de troisième corps de l'espèce χ_k pour la réaction i .

Les vitesses de réaction directes et inverses $K_{f,i}$ et $K_{r,i}$ sont données par :

$$K_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad K_{r,i} = \frac{K_{f,i}}{K_{c,i}}, \quad (1.33)$$

où E_i est l'énergie d'activation pour la réaction directe, et où $K_{c,i}$ est la *constante d'équilibre* pour la réaction i . Ces "constantes" sont données par les expressions suivantes:

$$K_{c,i} = \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\Delta \nu_i} \exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT}\right), \quad (1.34)$$

où:

$$\Delta \nu_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki}, \quad \Delta S_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} S_k^0(T), \quad \Delta H_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} H_k^0(T), \quad (1.35)$$

et où P_{atm} est la valeur en Pascals de la pression atmosphérique: $P_{atm} = 101325$.

Dans (1.35), $S_k^0(T)$ et $H_k^0(T)$ désignent respectivement les entropies et enthalpies de formation molaires de l'espèce k ; elles sont approchées par les relations suivantes :

$$\frac{S_k^0(T)}{R} = a_{1k} \ln T + a_{2k} T + \frac{a_{3k}}{2} T^2 + \frac{a_{4k}}{3} T^3 + \frac{a_{5k}}{4} T^4 + a_{7k} , \quad (1.36)$$

$$\frac{H_k^0(T)}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T + \frac{a_{3k}}{3} T^2 + \frac{a_{4k}}{4} T^3 + \frac{a_{5k}}{5} T^4 + \frac{a_{6k}}{T} , \quad (1.37)$$

où les coefficients a_{lk} sont deux ensembles de constantes déterminées pour deux intervalles de températures, l'intervalle "haut" et l'intervalle "bas", correspondant respectivement à $T \geq T_{MID}(k)$ et $T \leq T_{MID}(k)$. Nous avons utilisé la librairie Fortran CHEMKIN [5] pour calculer les grandeurs thermodynamiques. L'utilisation de la bibliothèque CHEMKIN nous permet également de changer aisément le modèle de cinétique. L'enthalpie massique $h(T, Y) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k h_k(T)$ est alors déterminée à partir des relations:

$$h_k(T) = \frac{H_k^0(T)}{W_k} , \quad (1.38)$$

où l'enthalpie molaire $H_k^0(T)$ de l'espèce χ_k est donnée par (1.37).

1.3.3 Résolution numérique du système algébro-différentiel

Le système algébro-différentiel à résoudre est (1.27). La résolution s'effectue à l'aide du solveur de systèmes algébro-différentiels LIMEX [6], dérivé d'EULSIM [7]. LIMEX utilise une méthode d'extrapolation fondée sur la discrétisation semi-implicite d'un système linéairement implicite d'équations différentielles. Un tel système est du type $AY' = F(Y, t)$, où $Y(t)$ est le vecteur des inconnues, d'ordre n , t la variable indépendante, F une fonction de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ dans \mathbb{R}^n , A une matrice d'ordre n qui peut être singulière.

La seule difficulté réside alors dans le choix du pas d'espace local et donc du pas de temps. L'utilisation de routines d'adaptation automatique pour le pas d'espace paraît possible mais semble en pratique inutilement compliqué et cher. En outre, le critère de raffinement n'est pas clair et de toute façon inclut une part de choix arbitraire - dans l'estimation des bornes min et max du dit critère, de la taille minimale et maximale des pas. Il nous a donc paru beaucoup plus simple, souple et rapide de procéder de façon semi-empirique comme suit.

Lorsque l'on connaît les conditions initiales en aval au choc, et en particulier la température, on peut alors estimer un temps d'induction de la combustion $\tau^G(T_1)$ [8], qui ne dépend quasiment que de la température initiale T_1 . Ce temps est défini comme le point d'inflexion de la courbe $T(t)$. En supposant que la vitesse ne varie pas trop et reste de l'ordre de la vitesse initiale v_i , on peut obtenir une première estimation de la distance d'induction: $D_i \simeq D^G = v_i \tau^G(T_1)$. La distance D_i est en fait définie comme le point où la température en

aval au choc $T_1(s)$, fonction de l'abscisse curviligne le long d'une ligne de courant, change de courbure.

On effectue ensuite un premier calcul sur un maillage assez grossier. On obtient alors rapidement la distance maximale de calcul s_{max} ainsi que les zones de fort gradient, par exemple en température, qui est la variable déterminante pour fonder nos choix de paramètres. On choisit ensuite arbitrairement – et en pratique après simplement deux ou trois essais – un pas d'espace maximal δs_{max} , un pas d'espace minimal δs_{min} , et deux distances de début et fin de combustion s_{deb} et s_{fin} telles que $s_{deb} < s_{fin} \leq s_{max}$. Le pas local δs^n est ensuite déterminé selon deux progressions géométriques. La première progression conduit δs^n de la valeur initiale δs_{max} en $s = 0$ jusqu'à la valeur minimale δs_{min} en $s = s_{deb}$. La raison est donc égale à :

$$r = \frac{r_2 - 1}{r_2 - r_1} \quad (1.39)$$

avec

$$r_1 = \frac{\delta s_{max}}{\delta s_{min}} \quad \text{et} \quad r_2 = \frac{s_{deb}}{\delta s_{min}}. \quad (1.40)$$

Le pas demeure ensuite constant et égal à δs_{min} , entre s_{deb} et s_{fin} . La deuxième progression conduit enfin δs^n depuis la valeur minimale δs_{min} en $s = s_{fin}$ jusqu'à la valeur maximale δs_{max} à l'abscisse finale s_{max} .

Cet effort nécessaire pour adapter localement le pas d'espace permet d'éviter certains problèmes de stabilité, liés à l'emploi de trop grand pas d'espace pour LIMEX. En effet, ce solveur ajuste automatiquement son pas d'espace local, mais ne supporte pas de trop grandes disparités entre le temps caractéristique du système algébro-différentiel, qui pilote le pas local, et le pas imposé par l'utilisateur. Puisque cette première approche s'est révélé suffisante pour tous les essais numériques effectués, nous n'avons pas essayé de raffiner plus avant la stratégie d'optimisation du pas de temps local.

1.4 Réflexion normale et effet de Mach

1.4.1 Réflexion normale

Supposons qu'un choc incident, créé par exemple par une rampe, et séparant deux états où la vitesse a subi un changement brusque de direction, rencontre un mur de direction parallèle à la vitesse en amont du choc. Il peut alors, sous certaines conditions à déterminer, se réfléchir sur le mur et ramener, par l'intermédiaire d'un autre choc, la direction de la vitesse parallèle au mur. La situation envisagée est celle de la figure 1.3. Cependant, cette configuration ne peut être observée si la vitesse à l'aval du premier choc est trop faible : il faut que la vitesse normale de l'état amont au choc réfléchi soit supersonique.

On peut en conclure qu'une réflexion "normale" n'est possible que sous certaines conditions à déterminer précisément. L'étude de référence de telles configurations d'écoulements,

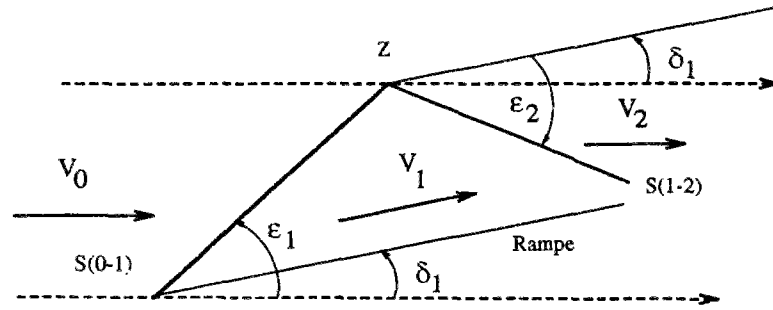


FIG. 1.3 - Réflexion "normale"

pour un gaz caloriquement parfait à $\gamma = 1.4$, est menée dans [10]. Les auteurs obtiennent alors deux graphes intéressants, donnant d'une part le domaine où une réflexion normale peut se produire, en fonction du rapport des pressions amont et aval au choc incident; et d'autre part, les relations entre l'angle du choc incident et l'angle du choc réfléchi, encore paramétrées par le rapport des pressions amont et aval. Ce paramètre permet en effet un traitement analytique plus commode. Plutôt que de reprendre ces calculs analytiques, nous allons mener une étude numérique dans le cas où les enthalpies sont polynomiales. Il est alors utile de construire les courbes donnant, en fonction de l'angle de déflexion δ , l'angle du choc réfléchi, ainsi que la pression, la température et le nombre de Mach aval au choc réfléchi. Ces courbes seront paramétrées par le nombre de Mach incident, qui semble plus facilement ajustable que le rapport des pressions amont-aval.

Une fois que l'on dispose des courbes donnant les grandeurs aval en fonction des grandeurs amont, i.e. des polaires de chocs, il suffit de doubler l'opération, en prenant cette fois comme condition amont au choc réfléchi les conditions aval au choc incident.

En fait, la résolution numérique s'effectue en deux volets :

- on paramètre le problème en faisant varier, pour un nombre de Mach incident donné, l'angle ε du choc incident. On détermine alors l'angle de déflexion δ correspondant, en résolvant l'équation polynomiale $D_x(\alpha) = 0$ comme pour les polaires de choc.
- une fois que l'on connaît ce δ , on détermine alors l'angle du choc réfléchi ε_R correspondant au même angle de déflexion δ et ayant pour conditions amont les conditions aval au premier choc. La méthode numérique employée est identique, mais on cherche cette fois les racines du polynôme en x , $P_\alpha(x) = D_x(\alpha)$, du vingtième degré en x . L'angle du choc réfléchi avec la direction de la vitesse incidente est alors $\varepsilon_2 = \varepsilon_R - \delta$.

Lorsque la deuxième opération est impossible numériquement (pas de racine trouvée), ou encore conduit à des grandeurs physiquement non acceptables, on peut alors en conclure que la configuration de réflexion normale est impossible pour les conditions envisagées.

La résolution numérique de $P_\alpha(x) = 0$ s'est en fait avérée plus ardue que celle de $D_x(\alpha) = 0$ en ce sens que nous avons capté des solutions "physiquement acceptables", mais qui induisent des discontinuités de comportement dans les solutions. Ces solutions parasites purement numériques, liées à la difficulté de choisir la "bonne" racine de P_α , ont été éliminées.

Nous supposons que l'état aval après le premier choc est inerte, alors que l'état après le deuxième choc est soit brûlé, soit inerte. Les résultats sont présentés dans la section 1.5.

1.4.2 Effet de Mach

Comme il a été noté dans la section précédente et ainsi que les résultats numériques vont le montrer section 1.5, la réflexion normale d'une onde de choc ne peut s'effectuer que sous certaines conditions : en particulier, elle n'a pas lieu lorsque le choc incident est trop fort – et que son état aval est subsonique –, i.e. lorsque l'angle du choc incident avec le mur est supérieur à l'angle limite ε_{lim} . Que se passe-t-il alors lorsque les conditions de réflexion normale ne sont pas satisfaites ?

Dans [10], il est démontré, dans le cas caloriquement parfait, que trois chocs m , S et S' , issus d'un seul point séparant seulement trois états distincts constituent une configuration impossible. Il est donc nécessaire qu'apparaisse une discontinuité supplémentaire : l'hypothèse la plus simple est que cette discontinuité soit une discontinuité de contact D . Une configuration possible est alors celle de la figure 1.4, toujours d'après [10].

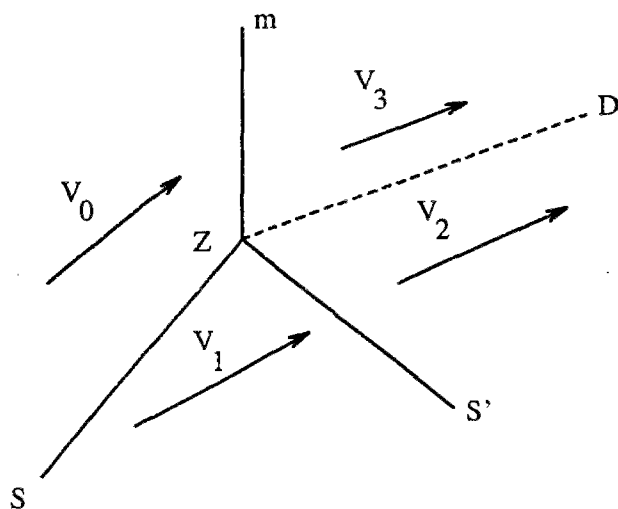


FIG. 1.4 - Configuration générale de l'effet de Mach

Un cas particulier de cette situation, correspondant à la figure 1.5, pourrait nous intéresser pour obtenir une portion de choc droit : la réflexion dite "de Mach en état permanent" [10] où l'écoulement s'effectue de façon perpendiculaire à l'onde de choc et parallèlement au mur ou au plan de symétrie. L'écoulement traverse le choc de Mach de façon normale au choc, et la discontinuité de contact est également normale au choc. Cette configuration permet à

l'écoulement d'être parallèle au mur en amont et en aval du choc droit.

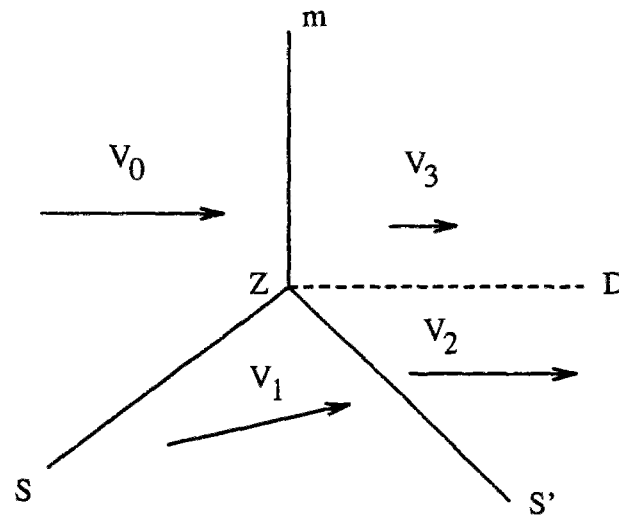


FIG. 1.5 - Configuration particulière : effet de Mach "en état permanent"

En pratique toutefois, cette configuration exacte ne peut apparaître que pour une relation précise entre le nombre de Mach amont de l'écoulement incident et l'angle de déflexion. En outre, pour la réflexion du choc oblique au point triple, tout se passe comme si le mur se trouvait au point Z . Or, nous avons déjà remarqué qu'il pouvait exister des conditions où il est impossible de ramener l'écoulement parallèle à sa direction de départ à travers deux chocs obliques. Dans ce cas, l'écoulement après le deuxième choc oblique fera un angle δ' non nul avec la direction de la vitesse incidente. Localement, autour du point triple Z , le choc de Mach fera un angle ε_3 presque égal à 90 degrés. Près du point O où le choc de Mach rencontre le mur ou l'axe de symétrie, le choc sera normal au mur ou à l'axe de symétrie. Le choc de Mach ne sera donc plus droit mais courbe, "quasi-droit". Une discontinuité de contact séparera alors l'état (2) derrière les deux chocs obliques, et l'état (3) derrière le choc quasi-droit autour du point triple. La configuration de l'écoulement est indiquée figure 1.6. Nous appellerons une telle configuration "réflexion par effet de Mach".

Pour déterminer les caractéristiques de l'écoulement – et ses conditions d'apparition et de stabilité, il suffit alors de déterminer les angles ε_3 et $\delta' = \delta_3$. La déduction des autres grandeurs est alors directe à partir des conditions de saut. Mathématiquement, cela revient à chercher ε_3 et δ_3 tels que, compte tenu des conditions de saut (1.2), les deux vitesses des états (2) et (3) soient parallèles et que les pressions de ces deux états soient égales. Classiquement, la détermination s'effectue de façon graphique sur les polaires de chocs – que nous déterminons section 1.5 – donnant la pression aval P en fonction de l'angle de déflexion δ .

Remarque 12 : Les situations d'écoulement décrites ci-dessus correspondent à des situa-

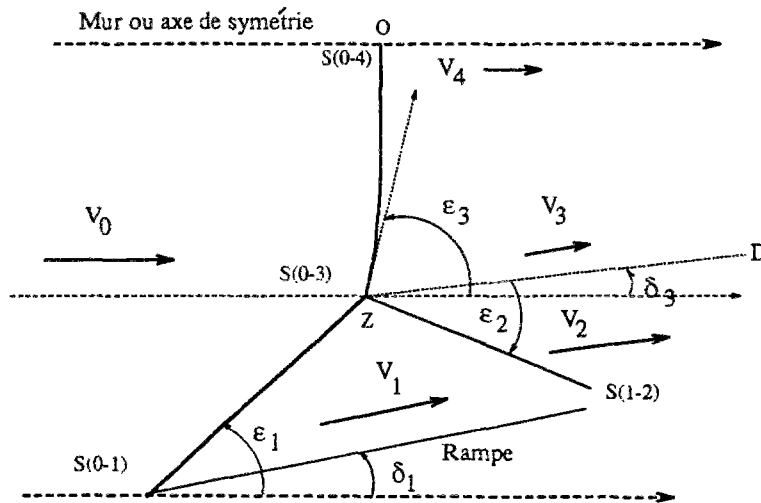


FIG. 1.6 - Réflexion par effet de Mach

tions **possibles** mais non certaines. On peut trouver des conditions sur le nombre de Mach amont et l'angle de déflexion de l'écoulement incident telles que la configuration obéisse aux équations d'Euler stationnaires. Mais on ne peut être sûr que ce soit la seule, ni que sa validité ne soit que très localisée géométriquement. En outre, la rampe provoquant le changement de direction de la vitesse n'est pas infinie. Il faut alors prendre en compte l'onde de raréfaction (cf. figure 1.7) et son interaction avec le deuxième choc oblique $S(1-2)$. On pourrait également envisager la réflexion sur la rampe du deuxième choc réfléchi, qui peut éventuellement être une réflexion de Mach. •

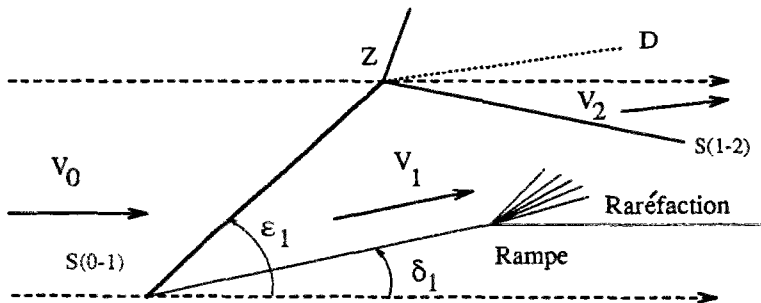


FIG. 1.7 - interaction choc réfléchi-onde de raréfaction

Remarque 13 : Les conditions de sortie ne sont prises en compte nulle part dans cette analyse, alors que l'écoulement derrière le choc quasi-droit est subsonique. La position du point d'intersection Z des trois chocs et de la ligne de glissement ne peut alors être déterminée selon cette approche simplifiée et nécessite justement la prise en compte des conditions de sortie et des interactions bidimensionnelles plus complexes. En outre, et comme il a été mentionné dans l'introduction, si l'écoulement en (2) est "suffisamment" supersonique, on peut espérer que par interaction des filets fluides externes rapides sur les filets subsoniques internes, l'écoulement redevienne globalement supersonique. Tous ces arguments qualitatifs

ne peuvent toutefois être vérifiés qu'à l'aide d'une simulation bidimensionnelle ou bien sûr par des données expérimentales. Une étude numérique bidimensionnelle est menée dans [9]. •

1.5 Résultats numériques

1.5.1 Obtention des polaires de choc

Dans les paragraphes suivants, nous construisons les courbes donnant l'angle du choc ε , la température, la pression, le nombre de Mach, la masse volumique, en fonction de l'angle de déflexion de la vitesse incidente δ . Nous nous plaçons successivement dans les deux cas où les enthalpies sont affines puis polynomiales. Dans chaque cas, nous envisageons un écoulement inerte ou réactif. Dans le cas caloriquement parfait sans combustion, si $\gamma_0 = \gamma_1 = \gamma$, la présentation classique est d'exprimer les rapports aval-amont de ces grandeurs en fonction de ε , du nombre de Mach amont M_0 et de γ . Comme ε n'est alors fonction que de δ , M_0 et γ , ces rapports ne dépendent également que de δ , M_0 et γ . Dans les autres cas, il faut également faire intervenir la dépendance par rapport aux autres grandeurs de l'état amont. Afin de faciliter la comparaison entre les cas, nous exprimons les grandeurs en unités physiques pour un état amont donné en pression et température. Nous ferons varier le nombre de Mach amont. Nous nous plaçons dans le cas d'un mélange air-hydrogène pauvre, dont la richesse est notée \mathcal{R} . Tous les essais présentés ici ont été effectués avec $\mathcal{R} = 0.5$. En aval du choc, le mélange gazeux est supposé être constitué d'oxygène, d'azote et d'hydrogène ou d'eau, selon que l'on considère un état inerte ou "complètement" brûlé. On ne tient pas compte dans l'état brûlé des espèces minoritaires présentes à l'équilibre chimique.

L'état inerte est constitué, pour une mole d' O_2 , de 3.79 moles de N_2 , et de $2\mathcal{R}$ moles de H_2 . L'état brûlé n'est alors constitué, pour 3.79 moles de N_2 , que de $2\mathcal{R}$ moles de H_2O et $1 - \mathcal{R}$ moles d' O_2 . On en déduit que les fractions molaires, notées X_χ^i pour l'état i et la molécule χ , sont données par :

$$\begin{cases} X_{H_2}^1 = \frac{2\mathcal{R}}{4.79 + 2\mathcal{R}}, X_{O_2}^1 = \frac{1}{4.79 + 2\mathcal{R}}, X_{N_2}^1 = \frac{3.79}{4.79 + 2\mathcal{R}}, X_{H_2O}^1 = 0, \\ X_{H_2}^2 = 0, X_{O_2}^2 = \frac{1 - \mathcal{R}}{4.79 + \mathcal{R}}, X_{N_2}^2 = \frac{3.79}{4.79 + \mathcal{R}}, X_{H_2O}^2 = \frac{2\mathcal{R}}{4.79 + \mathcal{R}}, \end{cases} \quad (1.41)$$

Lorsque l'écoulement est inerte, il vient que $X_\chi^2 = X_\chi^1$.

Remarque 14 : On a ainsi supposé que la composition chimique de l'équilibre était connue et fixée quelquesoit l'état final. En toute rigueur, l'équilibre est divariant et dépend par exemple de la température et de la pression. Il faudrait faire intervenir les autres espèces du modèle de cinétique, dont les fractions massiques à l'équilibre peuvent atteindre quelques pour-cents pour les plus importantes. L'introduction de ces inconnues supplémentaires ne permet plus un traitement numérique relativement simple. Dans l'optique d'une étude préliminaire à une simulation bidimensionnelle, nous conviendrons que cette première approche est suffisante.

Nous reviendrons sur cette remarque lors de l'étude nous permettant d'accéder aux distances d'allumages à l'aval des chocs, à la section 1.5.4. •

Les masses molaires W en $g.mol^{-1}$ seront prises égales à :

$$W_{O_2} = 32, W_{N_2} = 28, W_{H_2} = 2, W_{H_2O} = 18. \quad (1.42)$$

La masse molaire moyenne du mélange est alors simplement la moyenne des masses molaires pondérée par les fractions molaires :

$$W_{moy}^i = W_i = \sum_{\chi \in \{H_2, O_2, N_2, H_2O\}} X_{\chi}^i W_{\chi} \quad (1.43)$$

La variation d'enthalpie de la réaction globale est donnée par la relation (1.12). La valeur de ϑY_C en Kelvin sera prise égale à [11, 12]:

$$\vartheta Y_C = 3636 X_{2,H_2O} \quad (1.44)$$

Les rapports des capacités calorifiques seront pris égaux dans le cas caloriquement parfait sans combustion et fixés à leur valeur amont, déterminée par les polynômes de la bibliothèque CHEMKIN. Pour une richesse de 0.5, et une température amont de 700 K, on trouve $\gamma_0 = \gamma_1 = 1.368$, valeur proche de la valeur usuelle pour l'air de 1.4. Remarquons que la valeur aval est nécessairement légèrement erronée si la température aval augmente de façon trop importante. Pour le cas avec combustion, on choisit arbitrairement la valeur de 1.3 pour γ_1 , pour tous les nombres de Mach amont. On déduit alors les capacités calorifiques à pression constante à l'aide de la relation (1.5).

Remarque 15 : Cette valeur pour γ_1 est arbitraire et correspond approximativement à une moyenne des valeurs dans la gamme de variation des températures. Pour un intervalle de températures comprises entre 700 et 5000 K, le γ_1 aval varie entre 1.368 et 1.2 environ. Une éventuelle correction pourrait consister à reprendre les calculs avec une nouvelle valeur de γ_1 correspondant à la température aval trouvée avec la valeur initiale de γ_1 , voire même à recommencer cette opération plusieurs fois. Toutefois, cette approche semble coûteuse et peu utile, compte tenu des autres approximations du modèle. En outre, la solution "vraie" est obtenue en résolvant le cas où les enthalpies sont polynomiales, i.e. en trouvant la racine de D_x . La racine de P_x avec $\gamma_1 = 1.3$ est alors une approximation initiale suffisante pour déterminer les zéros de D_x . •

Les résultats sont données pages suivantes, sur les figures 1.8 à 1.12, pour une température amont de 700 K, une pression amont de 0.1 atm et un nombre de Mach amont variant par pas de 0.5 de 1.5 à 5 dans le cas sans combustion et de 3 à 5 dans le cas avec combustion. Le

nombre de Mach aval M_1 est donné par $M_1 = \frac{v_1}{c_1}$, où v_1 est le module de la vitesse aval, c_1 la vitesse du son aval. Pour un gaz parfait, la vitesse du son est égale à $c_1 = \frac{\gamma_1 RT_1}{W_1}$ et $\gamma_1 = \frac{c_p(T_1)}{c_v(T_1)}$.

Remarque 16 : Pour les conditions amont données ci-dessus, on trouve un M^* limite de 1.605 (cf. théorème 5). Toutefois, comme le cas avec enthalpies réelles n'admet des solutions qu'à partir de Mach 3 environ, nous avons préféré débiter les calculs avec combustion à partir de ce Mach même dans le cas caloriquement parfait afin de maintenir la cohérence des résultats.●

De même, on peut déterminer les angles ε_{min} correspondant aux conditions amont pour un Mach amont donné et la valeur numérique de la chaleur de réaction Δh_0 précisée plus haut. Les résultats sont portés dans le tableau ci-dessous, correspondant au cas où les enthalpies sont affines en température (on a également indiqué l'angle δ_{min} correspondant) :

Mach amont	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
ε_{min} (deg.)	53.39	39.95	32.35	27.30	23.66	20.90	18.72
δ_{min} (deg.)	9.33	8.83	8.40	7.71	6.52	5.96	5.02

Des polaires de choc, on peut également évaluer les angles limites pour le cas des enthalpies polynomiales, à un quart de degré près :

Mach amont	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
ε_{min} (deg.)	75.25	56.00	46.50	40.25	35.50
δ_{min} (deg.)	9.47	15.1	14.9	14.5	13.1

1.5.2 Obtention des conditions en aval du choc réfléchi

Les conditions des calculs sont identiques à celles de la section précédente. Les résultats sont présentés figures 1.13 à 1.18, l'angle du choc réfléchi étant égal à l'angle que fait le deuxième choc avec la direction de la vitesse incidente pour ce choc, comme le montre la figure 1.3. On suppose que l'état amont au choc réfléchi est inerte, alors que l'état aval peut être soit brûlé, soit inerte.

Nous présentons successivement, pour le cas où les enthalpies sont polynomiales, l'angle du choc réfléchi en fonction de l'angle du choc incident, puis en fonction de l'angle de déflexion δ_1 du choc incident, l'angle du choc réfléchi, la température, la pression, le nombre de Mach et la masse volumique. On fait encore varier le nombre de Mach amont M_0 de 3 à 5 pour le cas où l'état aval au deuxième choc réfléchi est brûlé, et de 1.5 à 4 lorsque le mélange est inerte.

Il ressort immédiatement de ces courbes est que, pour un nombre de Mach incident amont donné, une valeur limite de l'angle de déflexion δ_{lim} au dessus de laquelle la réflexion normale n'est plus possible, aussi bien dans le cas inerte que brûlé à l'aval du deuxième choc. On observe également qu'il existe une plage admissible pour l'angle du choc incident en dehors de laquelle

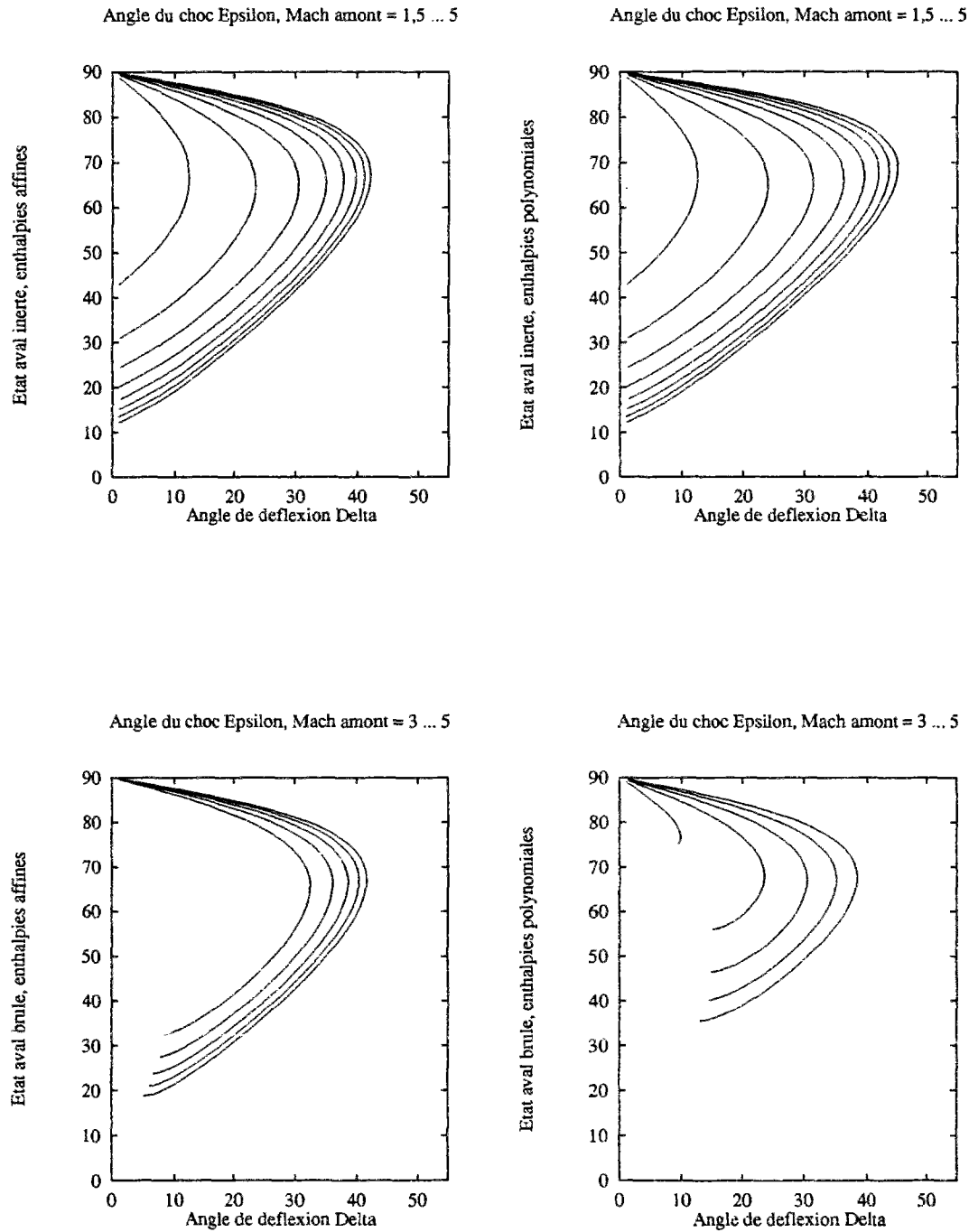


FIG. 1.8 - Polaires donnant l'angle du choc ϵ en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)

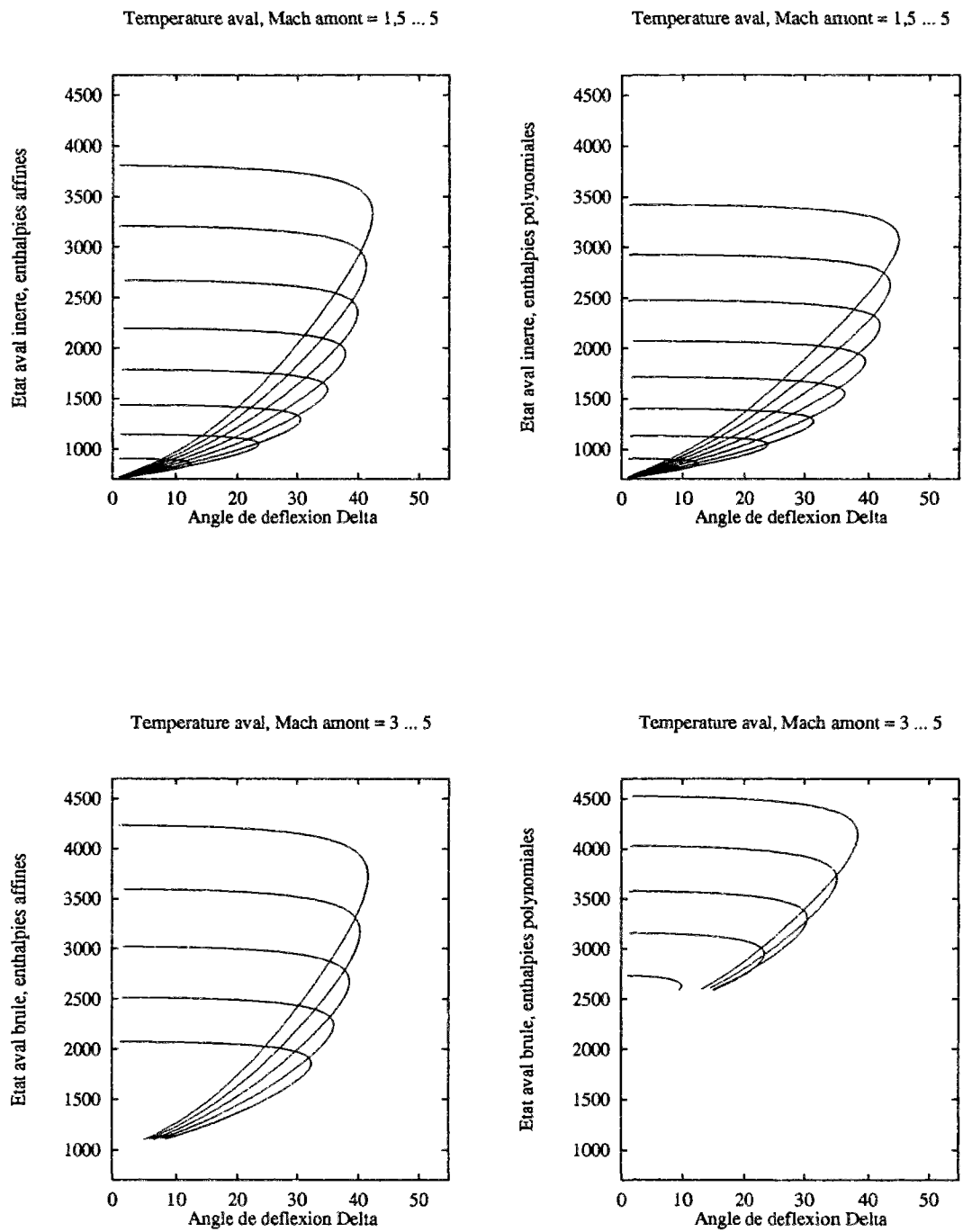


FIG. 1.9 - Polaires donnant la température aval (K) en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)

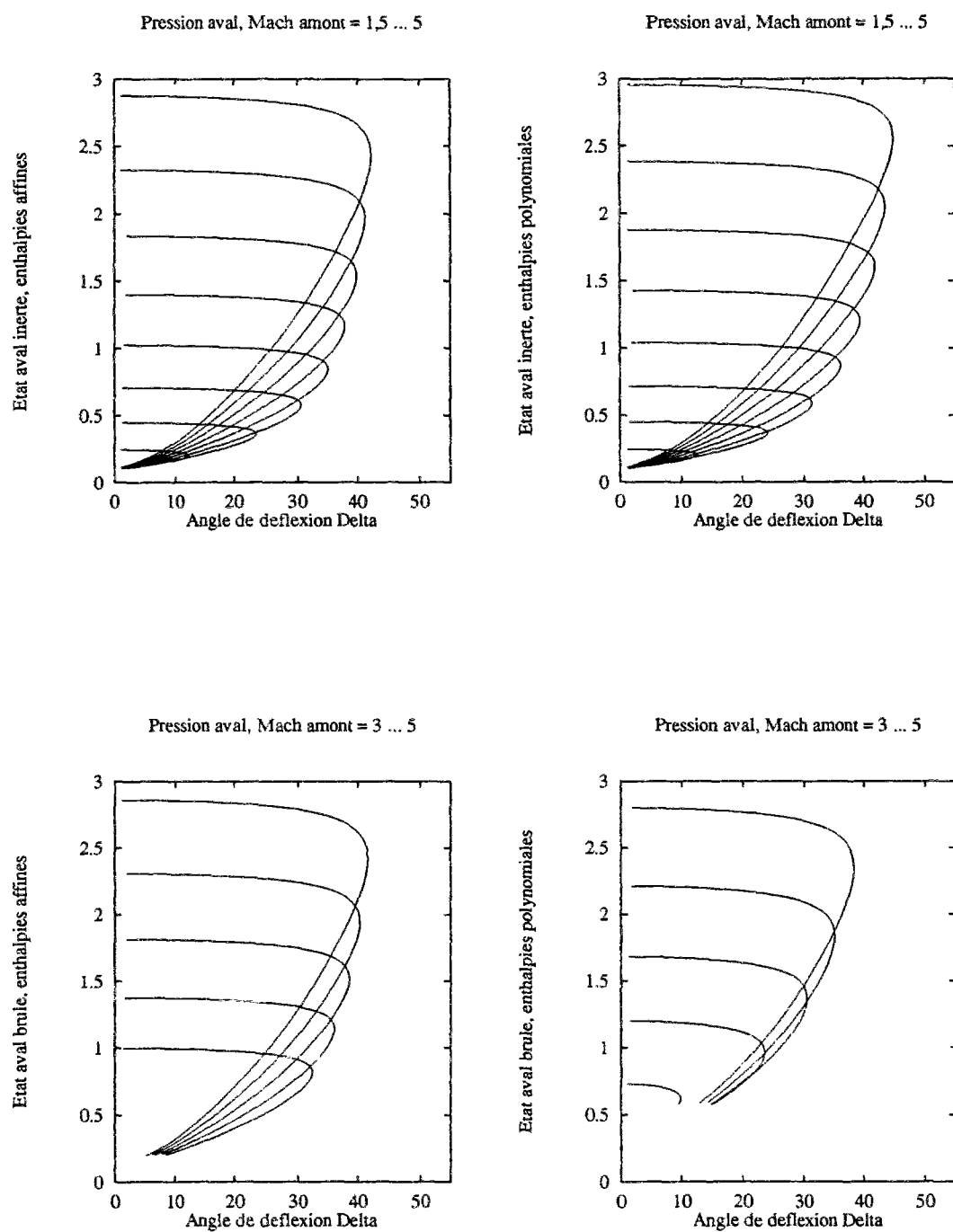


FIG. 1.10 - Polaires donnant la pression aval (atm) en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)

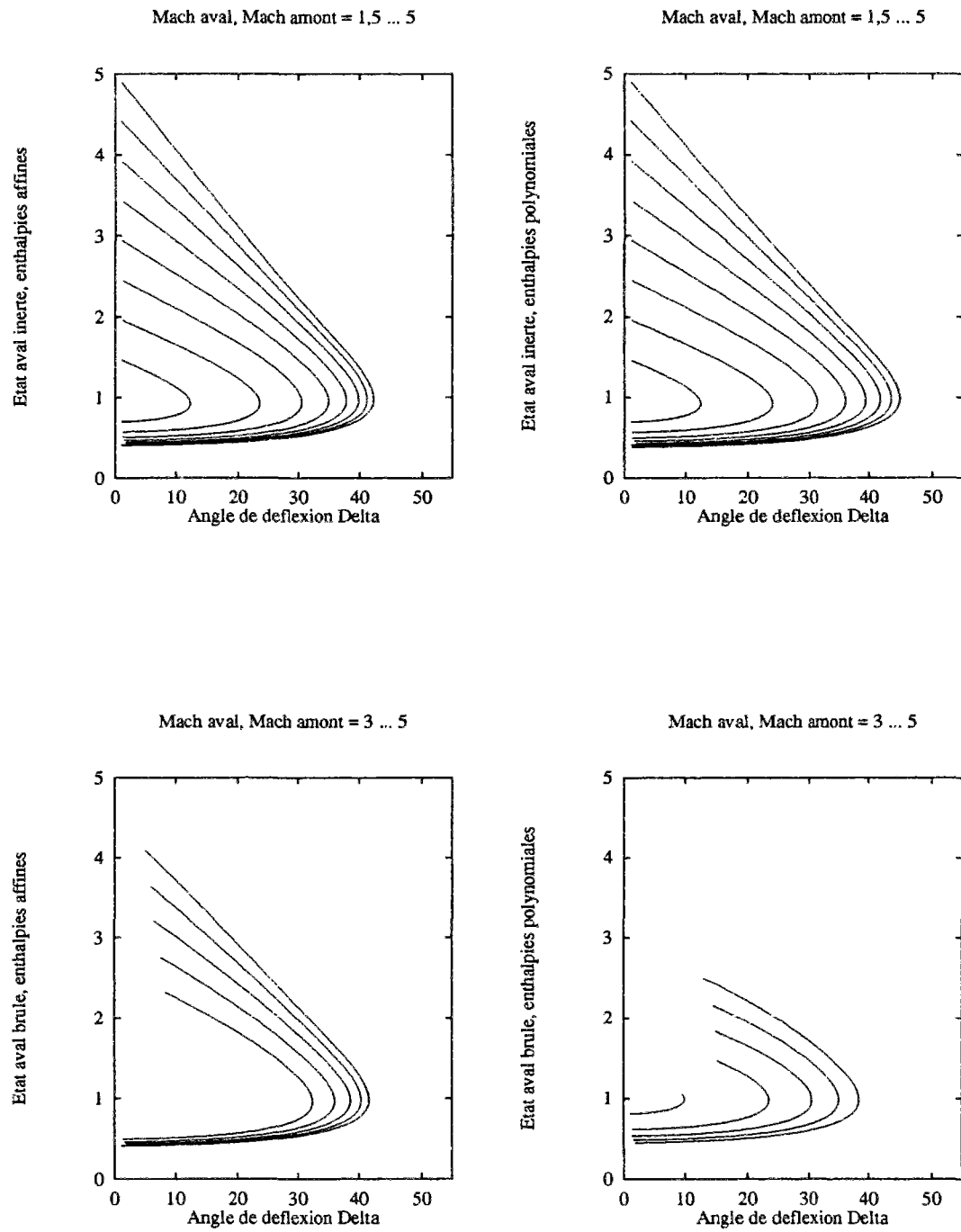


FIG. 1.11 - Polaires donnant le nombre de Mach aval en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)

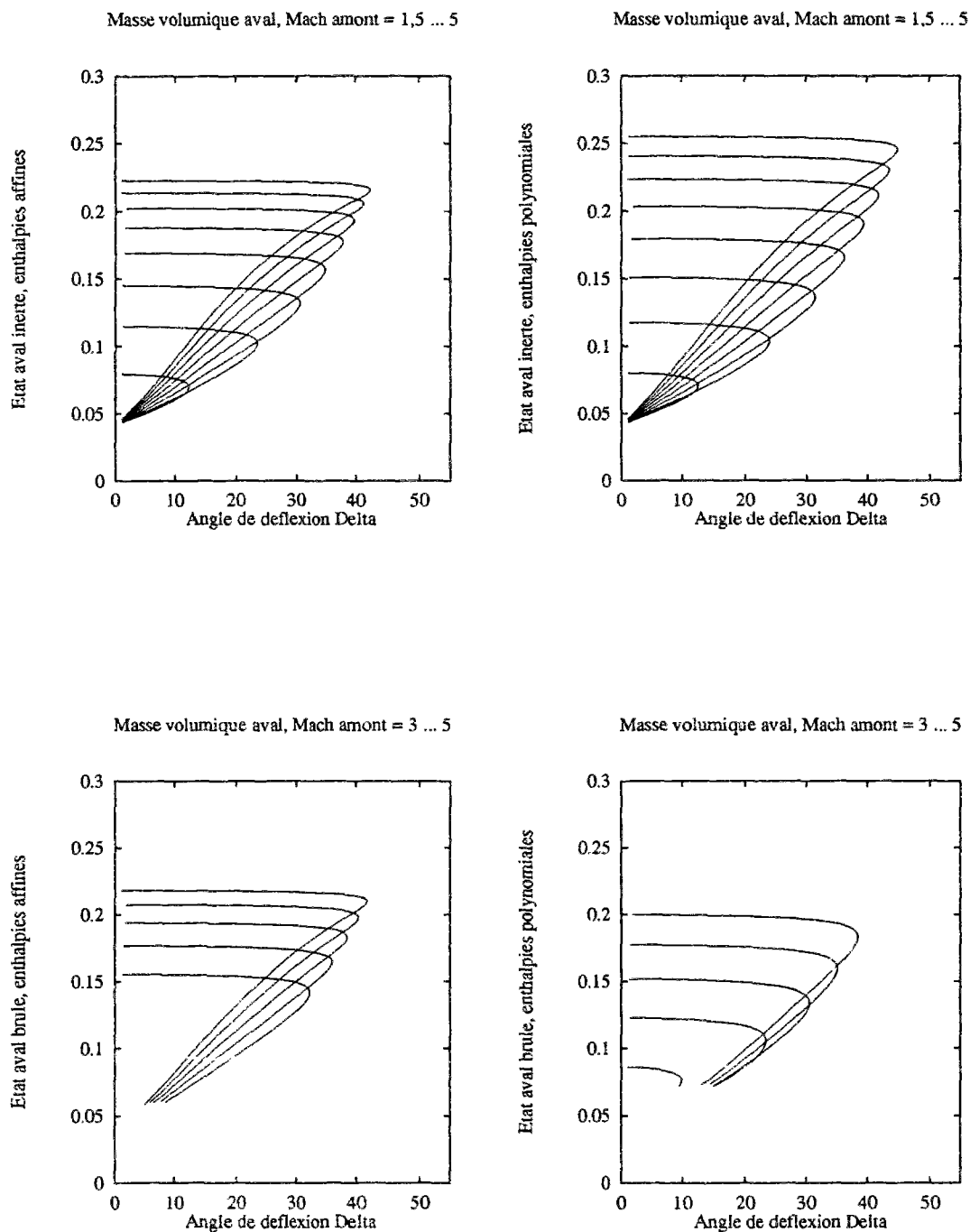


FIG. 1.12 - Polaires donnant la masse volumique aval (kg.m^{-3}) en fonction de l'angle de deflexion δ (deg.)

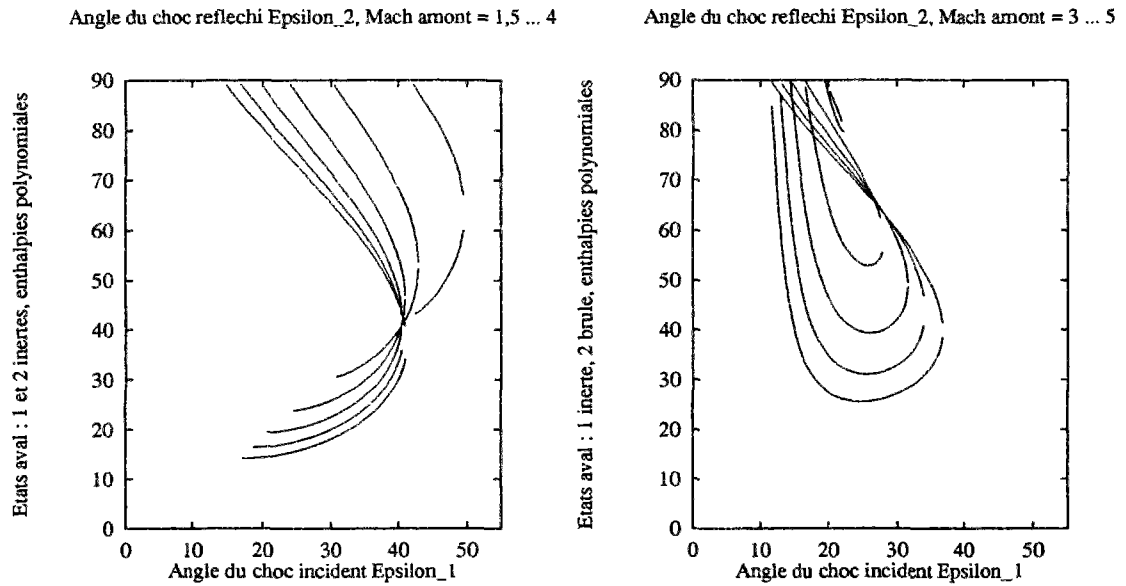


FIG. 1.13 - Polaires donnant l'angle du choc réfléchi ϵ_2 (deg.) en fonction de l'angle du choc incident ϵ_1 (deg.)

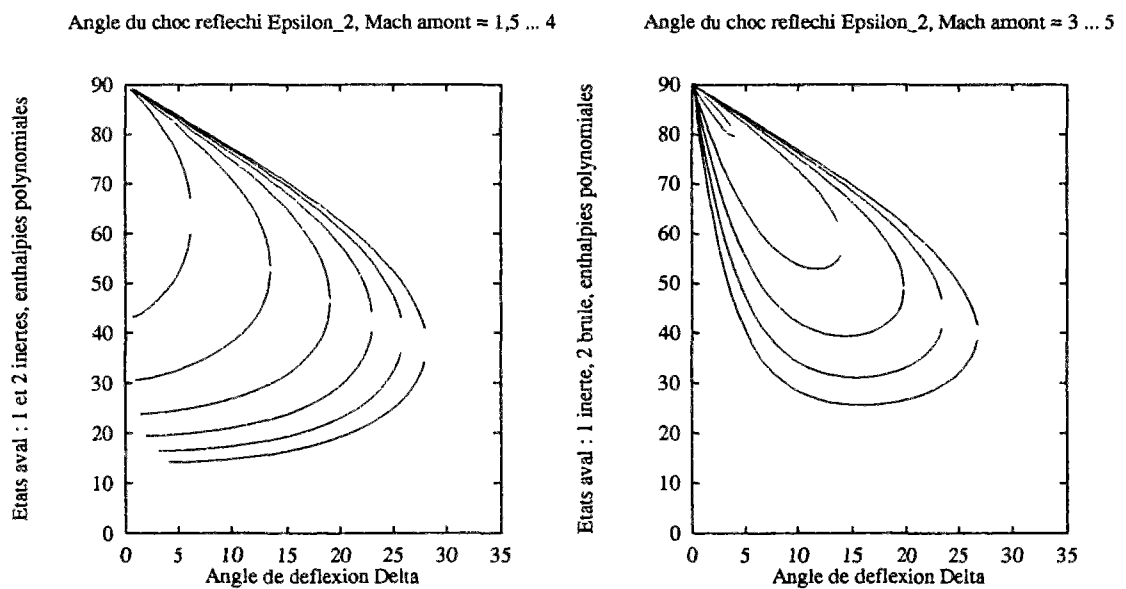


FIG. 1.14 - Polaires donnant l'angle du choc réfléchi ϵ_2 (deg.) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)

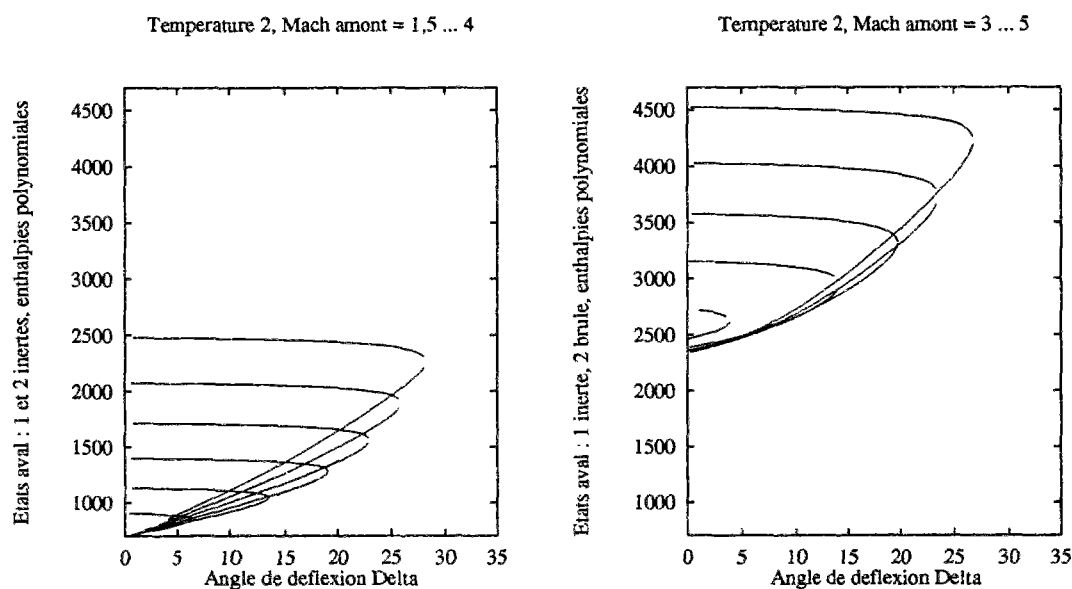


FIG. 1.15 - Polaires donnant la température aval au choc réfléchi (K) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)

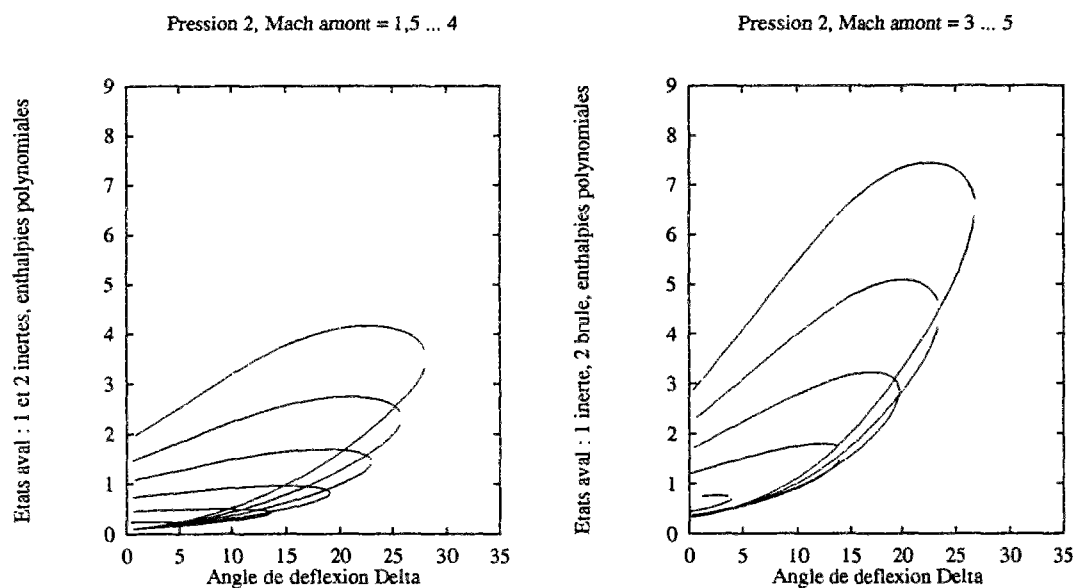


FIG. 1.16 - Polaires donnant la pression aval au choc réfléchi (atm) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)

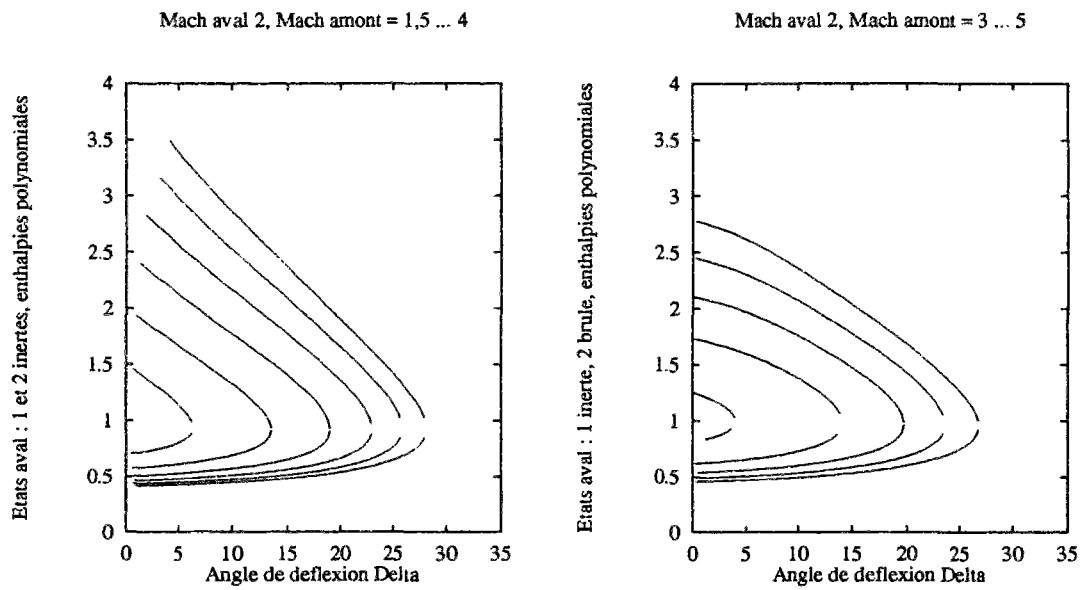


FIG. 1.17 - Polaires donnant le nombre de Mach aval au choc réfléchi en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)

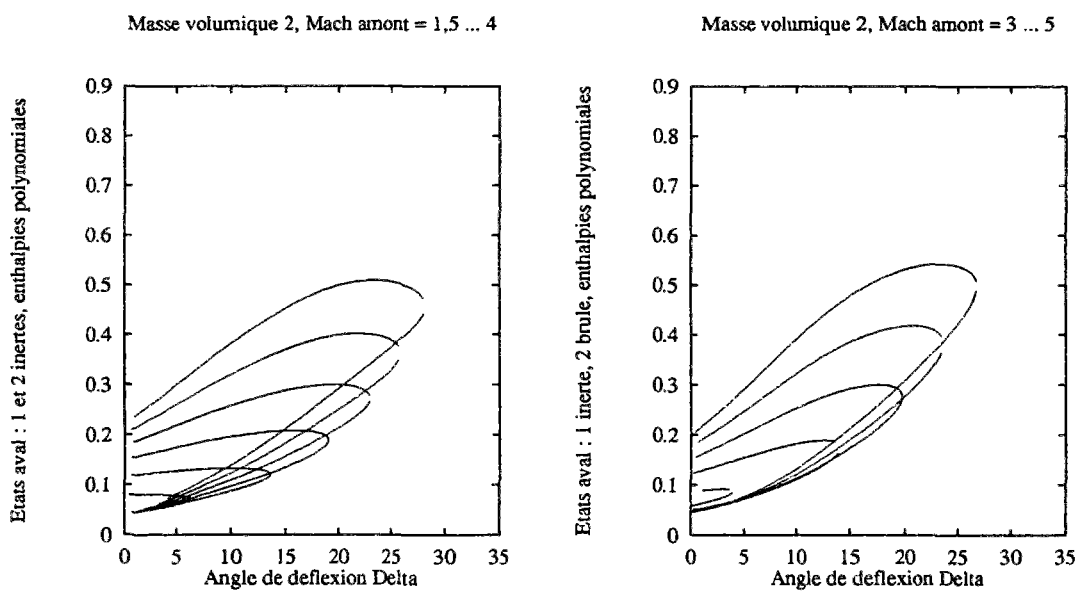


FIG. 1.18 - Polaires donnant la masse volumique aval au choc réfléchi (kg.m^{-3}) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)

une réflexion normale n'est pas possible. Les valeurs δ_{lim} peuvent se déduire directement et sont indiquées dans le tableau ci-dessous :

Mach amont	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
δ_{lim} (deg.) : Etat 2 inerte	6.30	13.6	19.1	23.0	25.8	28.1	-	-
δ_{lim} (deg.) : Etat 2 brûlé	-	-	-	3.62	13.7	19.8	23.4	26.8

1.5.3 Analyse de l'effet de Mach

A un angle de déflexion δ_1 initial correspond un angle de choc ε_1 . Ce premier choc (0-1) se scinde alors en deux chocs et une ligne de glissement. Le deuxième choc (1-2) fait un angle ε_2 avec la direction de la vitesse aval au choc (0-1); le troisième choc (0-3) fait un angle ε_3 avec la direction de l'écoulement incident (0). La ligne de glissement \mathcal{D} fait un angle δ_3 avec la direction de l'écoulement incident (0). Notons $\mathcal{O}_I^{fort}(i, \delta_i)$, $\mathcal{O}_I^{faible}(i, \delta_i)$, $\mathcal{O}_B^{fort}(i, \delta_i)$ et $\mathcal{O}_B^{faible}(i, \delta_i)$ les opérateurs donnant l'état aval inerte ou brûlé, correspondant aux cas où le choc est fort ou faible (cf. remarque 8), en fonction de l'état amont i (non brûlé) et de l'angle de déflexion δ_i . Les états de la figure 1.6 peuvent alors être reliés selon :

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) = \mathcal{O}_I^{faible}(0, \delta_1) \\ (2) = \mathcal{O}_I^{faible}(1, \delta_1 - \delta_3) \\ (3) = \mathcal{O}_B^{fort}(0, \delta_3) \quad \text{ou bien} \quad \mathcal{O}_I^{fort}(0, \delta_3) \\ (4) = \mathcal{O}_B^{fort}(0, \delta = 0) \quad \text{ou bien} \quad \mathcal{O}_I^{fort}(0, \delta = 0) \end{array} \right. \quad (1.45)$$

Le choc (0-4) est droit et donc la discontinuité séparant l'état (0) et les états (3) et (4) est un choc courbe, comme il a déjà été signalé. Les inconnues du système (1.45) sont alors, outre les valeurs des grandeurs physiques des états (1), (2), (3), (4), les valeurs des angles ε_1 , ε_2 , ε_3 , et δ_3 . L'angle ε_1 et l'état (4) se déduisent directement. Les autres grandeurs peuvent se déduire de la connaissance de l'angle δ_3 . Cet angle peut se déterminer de façon graphique, puisque les états (2) et (3) doivent avoir même pression et même direction de vitesse. Considérons la polaire de choc donnant la pression aval par rapport à l'angle de déflexion δ . Cette polaire est déterminée par les conditions de l'état amont (0) : température, nombre de Mach, pression, composition. Pour un angle δ_1 donné, correspondant à l'angle de la rampe, on peut alors tracer depuis ce point une seconde polaire de choc ayant pour conditions amont les conditions aval (1) au choc (0-1) provoqué par la première déflexion δ_1 . La deuxième polaire est fonction de l'angle $\delta_1 - \delta$ d'après la deuxième équation de (1.45). L'intersection des deux polaires fournit l'angle δ_3 et partant toutes les autres grandeurs.

En guise d'illustration numérique, nous avons tracé sur la figure 1.19 les polaires correspondant à un état amont donné par $T_0 = 700 \text{ K}$, $P_0 = 0.1 \text{ atm}$, $\delta_1 = 24.62 \text{ deg}$ avec un nombre de Mach incident M_0 de 3.200. Ce cas correspond bien à une impossibilité, d'une part, de déflexion normale avec allumage, (cf. polaires de la figure 1.8), et d'autre part, de

réflexion normale, avec ou sans combustion (cf. polaires de la figure 1.13). On ne trouve numériquement pas de solution possible correspondant à un état 2 brûlé. Le temps d'allumage correspondant à la température de 1362 K de l'état 2 inerte, est de l'ordre de 2.10^{-3} s, ce qui conduit, en prenant une valeur constante de la vitesse, à une distance d'ignition de l'ordre de 3 mètres. Cette longueur est bien supérieure à la longueur caractéristique des géométries bidimensionnelles envisagées, inférieure à un mètre.

L'intersection "graphique" a été en fait obtenue de façon numérique par interpolation. Les résultats obtenus avec les enthalpies polynomiales sont récapitulés dans le tableau suivant :

Etats	Mach	Température (K)	Pression (atm)	ε (deg.)	δ (deg.)
0 inerte	3.200	700.0	0.100	-	-
1 inerte	1.965	1181.	0.499	$\varepsilon_1 = 41.00$	$\delta_1 = 24.6$
1 brûlé	Pas de solution stationnaire				
2 brûlé, 1 inerte	Pas de solution stationnaire				
2 avec 3 brûlé	1.600	1362.	0.871	$\varepsilon_2 = 40.8$	-
3 brûlé	0.798	2861.	0.871	$\varepsilon_3 = 79.0$	$\delta_3 = 13.4$
4 brûlé	0.701	2911.	0.928	Choc droit avec combustion	
2 avec 3 inerte	1.354	1486.	1.185	$\varepsilon_2 = 49.0$	-
3 inerte	0.452	1850.	1.185	$\varepsilon_3 = 88.0$	$\delta_3 = 6.96$
4 inerte	0.448	1851.	1.190	Choc droit sans combustion	

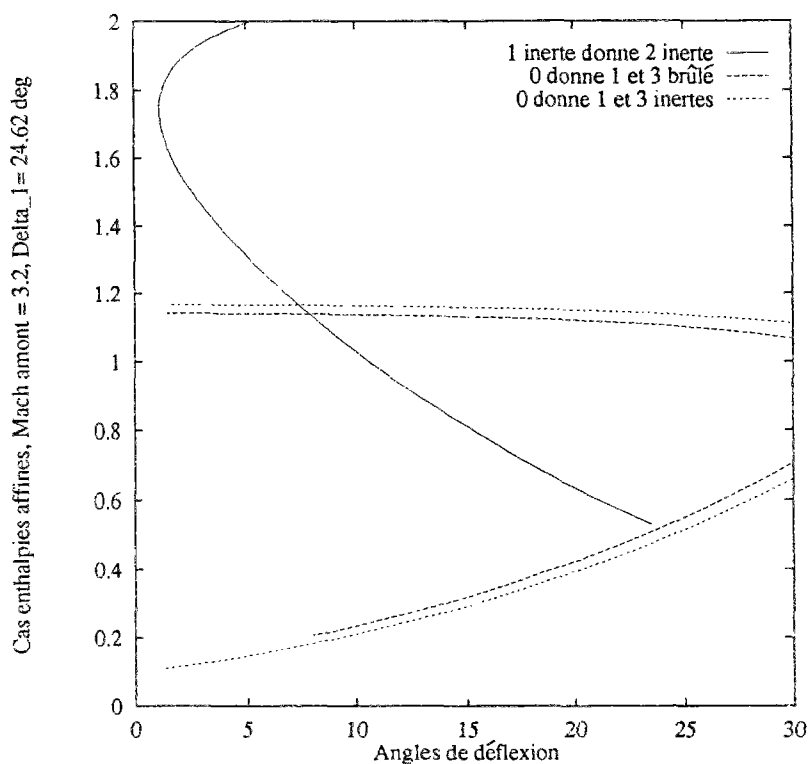
Les résultats de ce tableau montrent que les états 1 et 2 doivent être nécessairement considérés comme inertes. Par contre, les états 3 et 4 peuvent soit tous les deux inertes soient tout les deux brûlés. L'état 2 dépend du caractère brûlé ou inerte des deux états 3 et 4. Cependant, les fluides dans les états 3 et 4 "inertes" s'enflamment en fait rapidement (en environ 10^{-5} s à 1850 K, cf. [8], en première approximation) et il est alors difficile de considérer ces états comme inertes, pour des longueurs typiques de superstatoréacteurs. La solution "physique" correspond donc plutôt aux états 3 et 4 brûlés.

Même dans ce cas (3 et 4 brûlés), la figure 1.19 montre que deux solutions sont possibles, contrairement au cas sans combustion. Pour nos calculs, la solution choisie correspondant au plus petit δ_3 . Cette solution redonne bien la solution du cas sans combustion lorsque l'on tend continûment vers ce dernier.

Les solutions obtenues avec ou sans approximation polynomiale pour les enthalpies montrent des différences non négligeables. En effet, si dans le cas où les enthalpies sont prises affines, il existe peu d'écart entre la solution sans combustion et la solution avec combustion, tel n'est pas le cas pour le cas des enthalpies polynomiales : presque 7 degrés pour un δ_3 de 13.4 degrés.

Remarque 17 : Dans la réalité, puisque les lignes de courants ne sont pas vraiment des droites (cf. remarque 6), il est raisonnable de supposer que l'angle δ_3 effectif sera compris entre

Détermination du point 2,3 sur les polaires pressions aval -- angle de déflexion



Détermination du point 2,3 sur les polaires pressions aval -- angle de déflexion

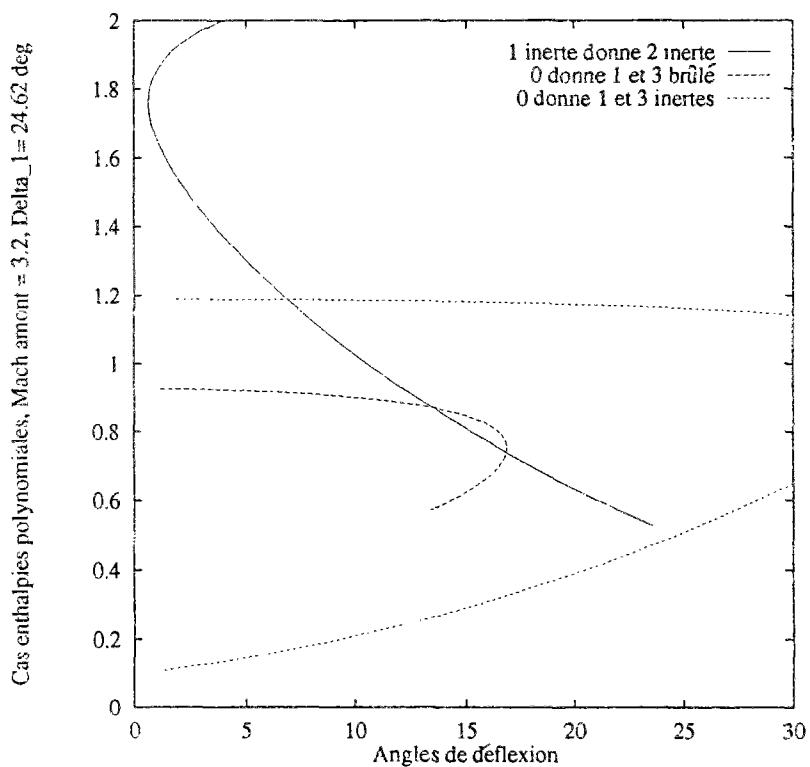


FIG. 1.19 - Détermination du point 2,3 : $\delta_1 = 24.62 \text{ deg.}$, état 2 inerte

6.96 et 13.4, solutions des deux cas extrêmes. Ce même type de remarque s'applique pour la détermination des distances d'allumages à l'aval des chocs, objet du paragraphe suivant. •

1.5.4 Détermination des distances d'induction

Dans le cas où l'on suppose que le mélange réactif s'enflamme effectivement, on a vu que l'on peut accéder à la valeur de l'angle du choc oblique pour un état amont connu. Mais, physiquement, la réaction chimique n'est pas instantanée. Les conditions juste derrière le choc correspondent donc à un état inerte non brûlé, mais très chaud. La distance parcourue par le fluide derrière le choc avant qu'il ne s'enflamme est la distance d'induction D_i , abscisse où la fonction $T(s)$ présente un point d'inflexion (cf. section 1.3.3). Nous allons maintenant chercher à évaluer les distances d'induction locales, à l'aval des chocs S(0-3) et S(0-4) de la figure 1.4.2.

Les informations relatives à l'état aval brûlé peuvent remonter l'écoulement et l'angle du choc stationnaire est alors déterminé par les valeurs de l'état brûlé, et non pas inerte, qui n'est qu'un régime transitoire. Comme il a déjà été signalé dans la section 1.3, nous allons résoudre le système algèbro-différentiel (1.27) en prenant comme état initial un état aval non brûlé, **mais avec un angle du choc ε correspondant au cas brûlé**. D'après la remarque 9, cet angle ε "brûlé" sera plus grand que celui correspondant à un état aval non brûlé. La température juste derrière le choc sera plus élevée, mais la vitesse plus petite. Si on linéarise l'équation (1.2.iv), les variations de vitesse et de température aval sont reliées par :

$$c_{p1} \Delta T_1 = -v_1 \Delta v_1 \quad (1.46)$$

On peut alors admettre que l'effet relatif à l'élévation de température est prépondérant, puisque une variation de température agit de façon exponentielle sur le temps d'induction [8] alors qu'une variation de vitesse agit seulement de façon linéaire sur la distance d'induction. A priori, on peut plutôt s'attendre à une diminution de la distance d'induction lorsque l'on prend un ε "brûlé" pour déterminer les grandeurs de l'état non brûlé aval, par opposition au cas où l'angle du choc est celui donné par un état aval inerte.

Pour l'état 4 à l'aval du choc droit, il n'y a bien sûr pas d'ambiguïté sur le choix de l'angle du choc.

Les calculs sont encore effectués dans le cas où l'angle de déflexion est de 24.62 degrés, le nombre de Mach amont de 3.2, la température et la pression amont respectivement de 700 K et 0.1 atm. Les résultats sont présentés figures 1.20 à 1.25. Le cas "choc droit" correspond à l'allumage à l'aval du choc droit (état 4). Le cas "état 3 inerte" correspond à l'allumage à l'aval du choc quasi-droit 3, avec des angles donnés par un état aval inerte ($\varepsilon_3 = 88.0, \delta_3 = 6.96$). Le cas "état 3 brûlé" correspond encore à l'allumage à l'aval du choc quasi-droit 3, mais **avec les angles donnés par un état aval brûlé** ($\varepsilon_3 = 79.0, \delta_3 = 13.4$), et des conditions initiales juste derrière le choc obtenues en injectant ces angles dans les relations géométriques

permettant d'accéder aux températures, vitesses et pressions de l'état aval. Ces conditions sont données par le tableau ci-dessous :

Etat initial	Vitesse (m.s ⁻¹)	Température (K)	Pression (atm.)	ε_3 (deg.)	δ_3 (deg.)
3 (3 final brûlé)	848.	2614.	0.871	$\varepsilon_3 = 79.0$	$\delta_3 = 13.4$

En fonction de la distance s au choc le long d'une courbe de courant, sont portés la température, la pression, le module de la vitesse, les fractions massiques de H_2O , OH , H_2O_2 , H et HO_2 .

On peut constater un écart assez sensible entre les grandeurs déterminées par le système (1.1) et les grandeurs finales obtenus par intégration le long d'une ligne de courant du système algébro-différentiel (1.27). Ces différences proviennent essentiellement de l'hypothèse que nous avons faite concernant la composition du mélange à l'équilibre, lorsque nous avons résolu (1.1) avec combustion.

Dans cette section, nous avons donc essentiellement déterminé les bornes min et max de la distance d'induction effective pour l'état 3. En effet, le cas complètement inerte fournit un majorant de D_i tandis que le cas "brûlé" surestime le dégagement de chaleur pour la détermination des angles des chocs, et donc aussi ces angles et les températures à leur aval ; cette approche nous fournit alors un minorant de D_i . Les résultats peuvent se lire ci-dessous :

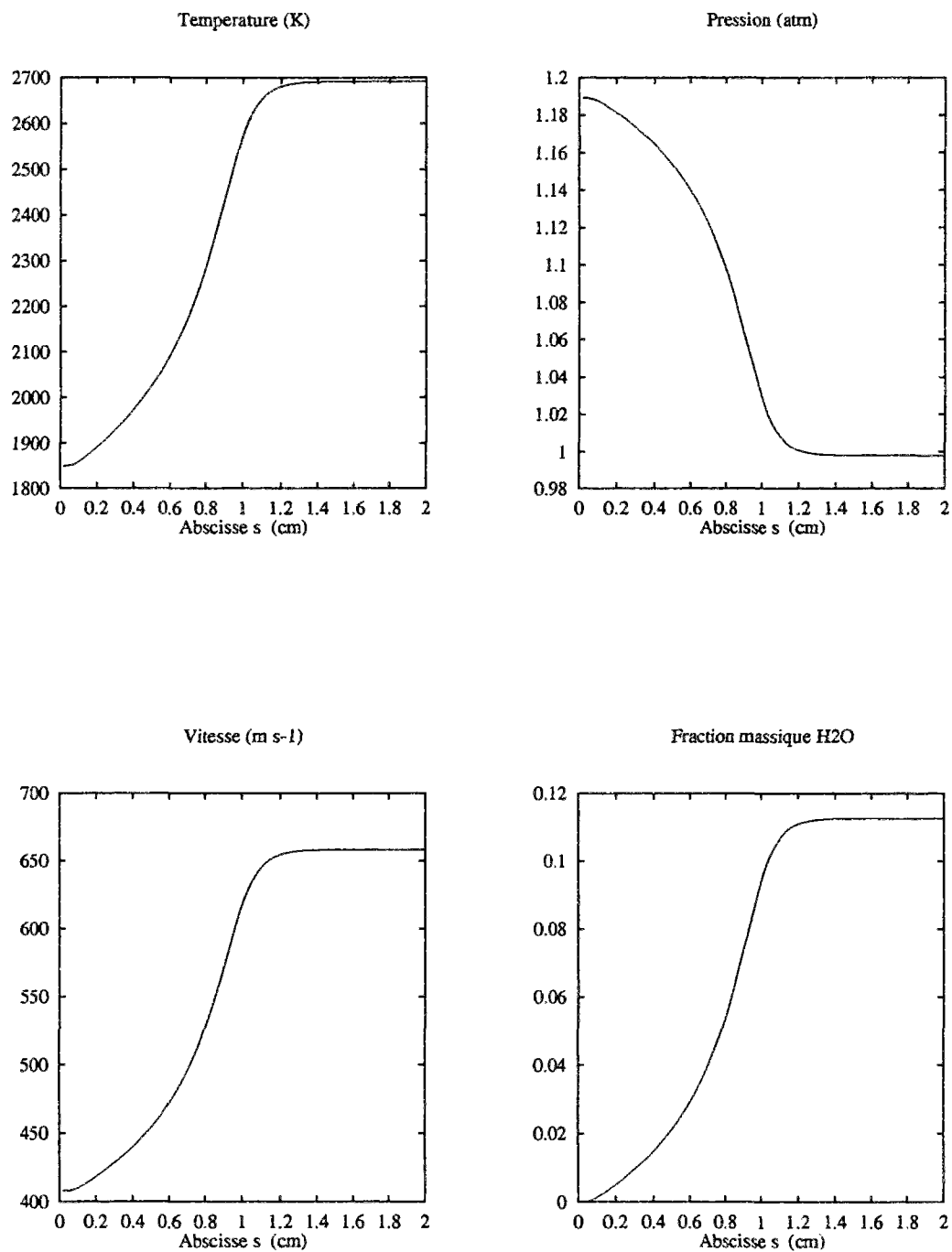
Etat	Distance minimale (cm)	Distance maximale (cm)
3	0.03	1.0
4 (droit)	0.8	0.8

Remarque 18 : Cette surchauffe ponctuelle pour l'état 3 provient de l'incohérence entre les angles ε_3 , δ_3 d'une part et la composition inerte du gaz d'autre part. Cette surchauffe conduit l'état 3 à être initialement bien plus chaud que l'état 4 aval au choc droit. La flamme est alors collée au choc quasi-droit alors qu'elle est sensiblement détachée – pour des longueurs caractéristiques inférieures au mètre – à l'aval du choc droit. •

1.6 Conclusions et perspectives

Cette analyse a permis de montrer qu'il est absolument nécessaire de prendre en compte la combustion pour déterminer les angles des chocs provoqués par une rampe. Nous avons ainsi mis en évidence l'influence de la combustion sur le système d'ondes de chocs et sur les distances d'allumage eels-mêmes. Classiquement dans la littérature, l'influence géométrique de la combustion sur l'écoulement n'est pas prise en compte [3], et la discussion est effectuée pour un écoulement inerte.

Dans le cas simplifié des enthalpies affines en température, nous avons prouvé analytiquement l'existence d'un nombre de Mach minimal M^* en dessous duquel aucun système

FIG. 1.20 - Cas choc droit: évolution de T , P , u et Y_{H_2O}

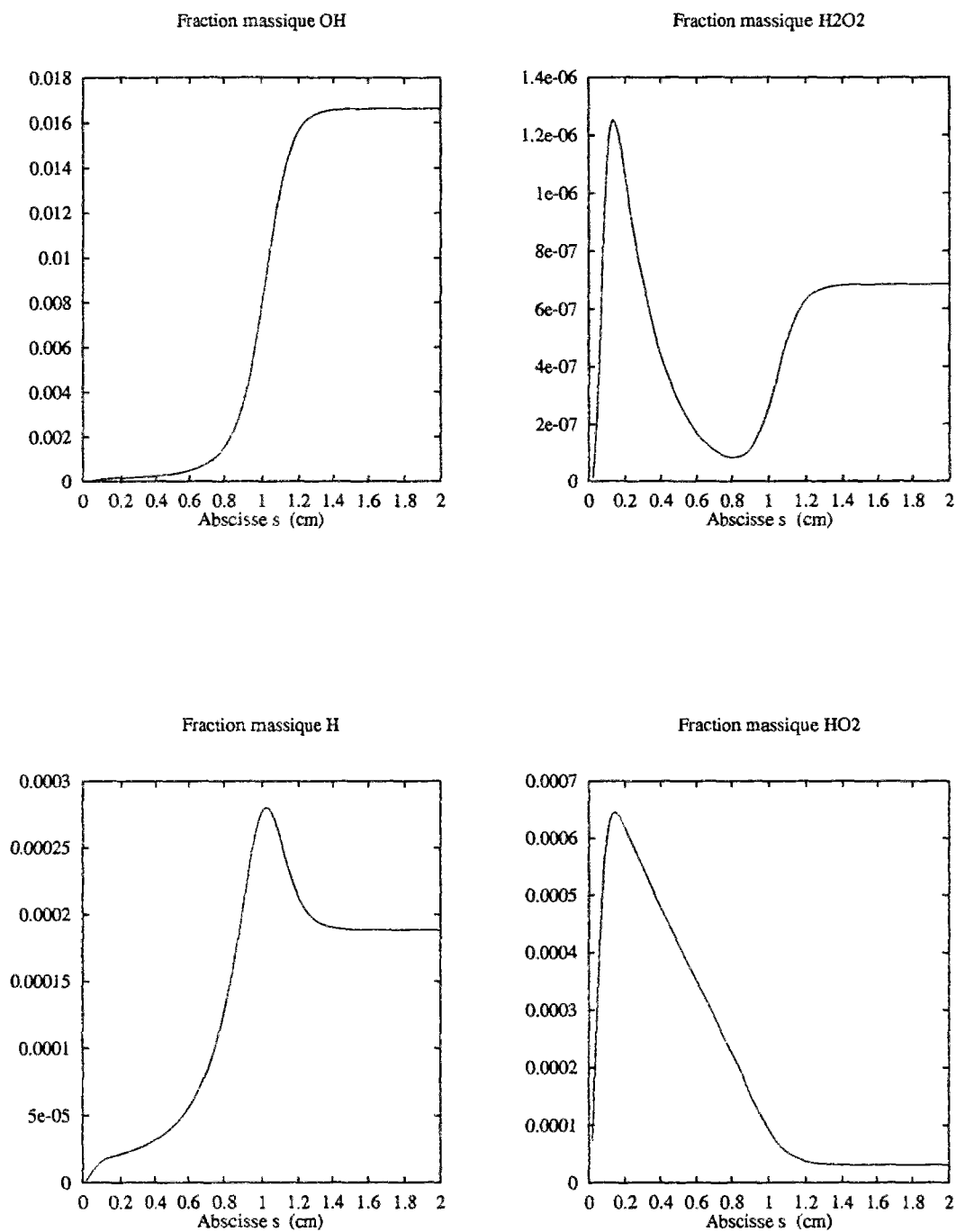
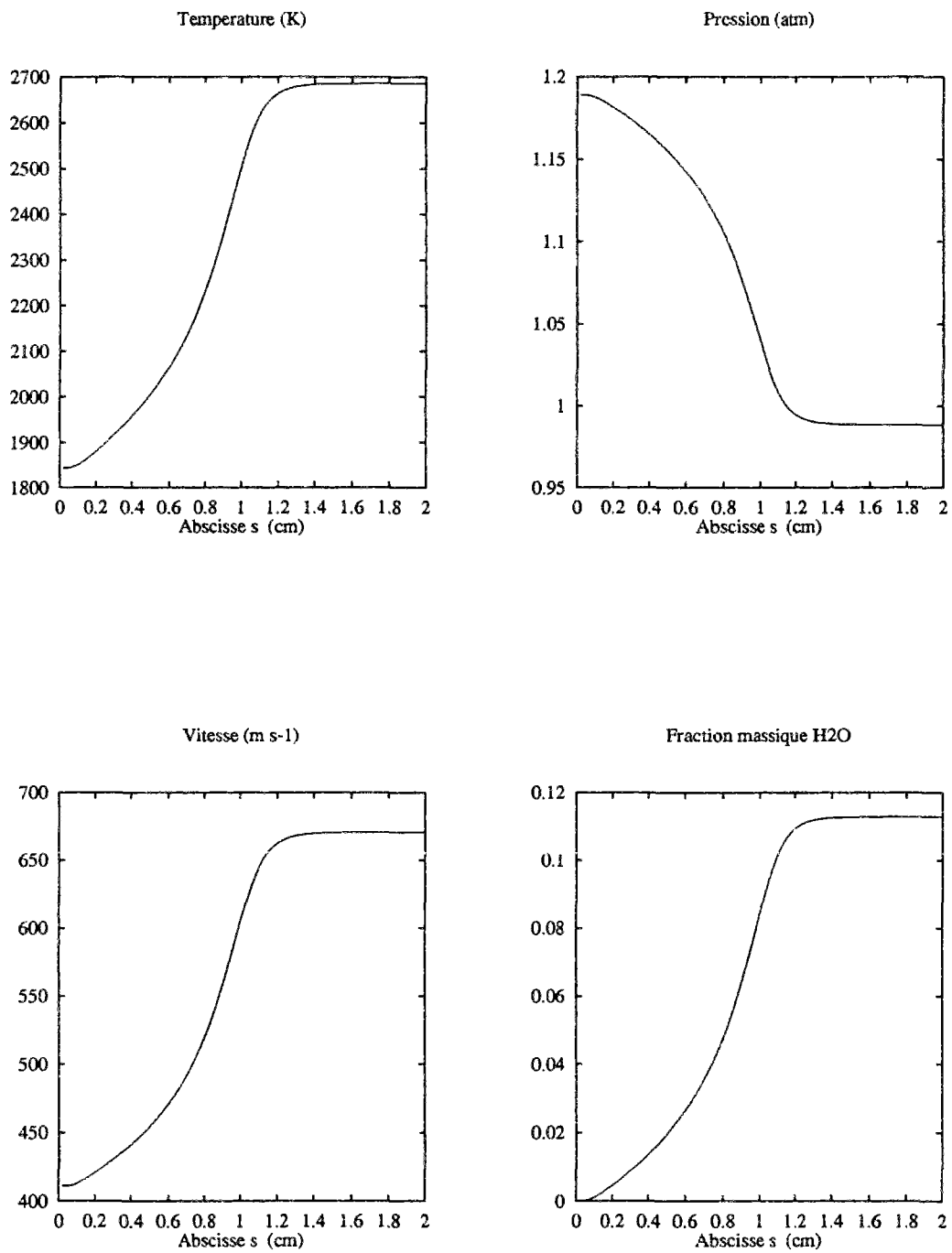


FIG. 1.21 - Cas choc droit : évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}

FIG. 1.22 - Cas état 3 inerte : évolution de T , P , u et Y_{H_2O}

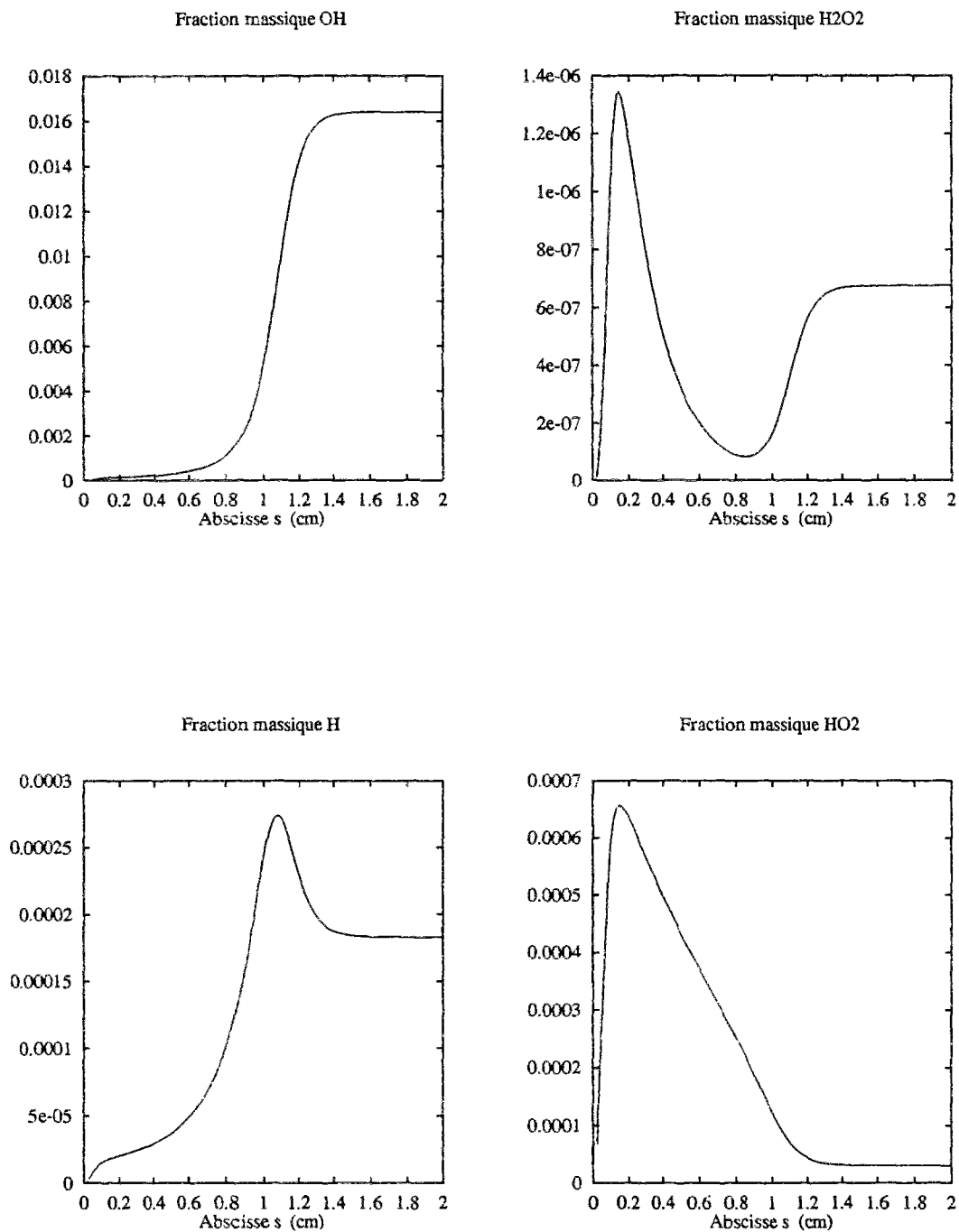
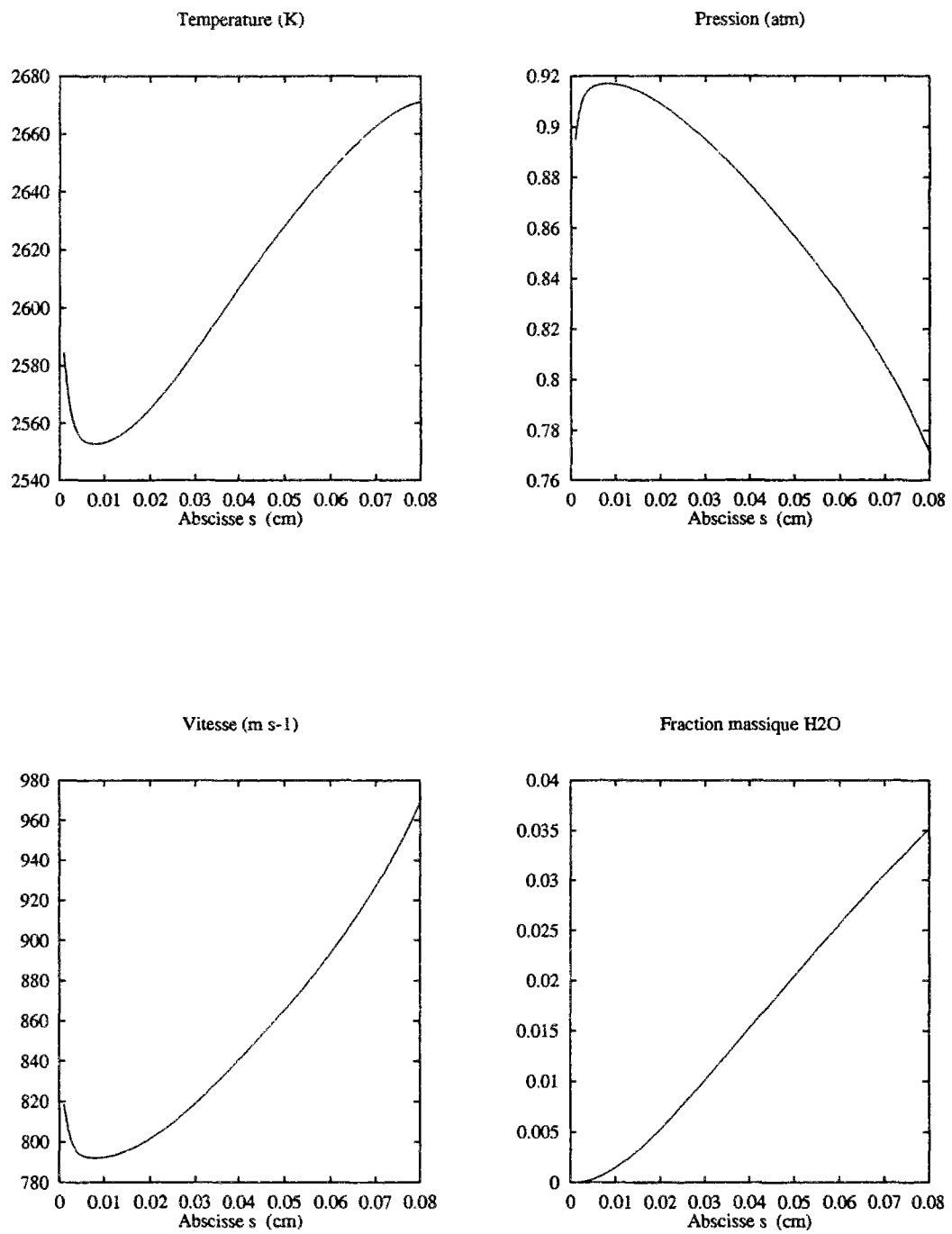


FIG. 1.23 - Cas état 3 inerte: évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}

FIG. 1.24 - Cas état 3 "brûlé": évolution de T , P , u et Y_{H_2O}

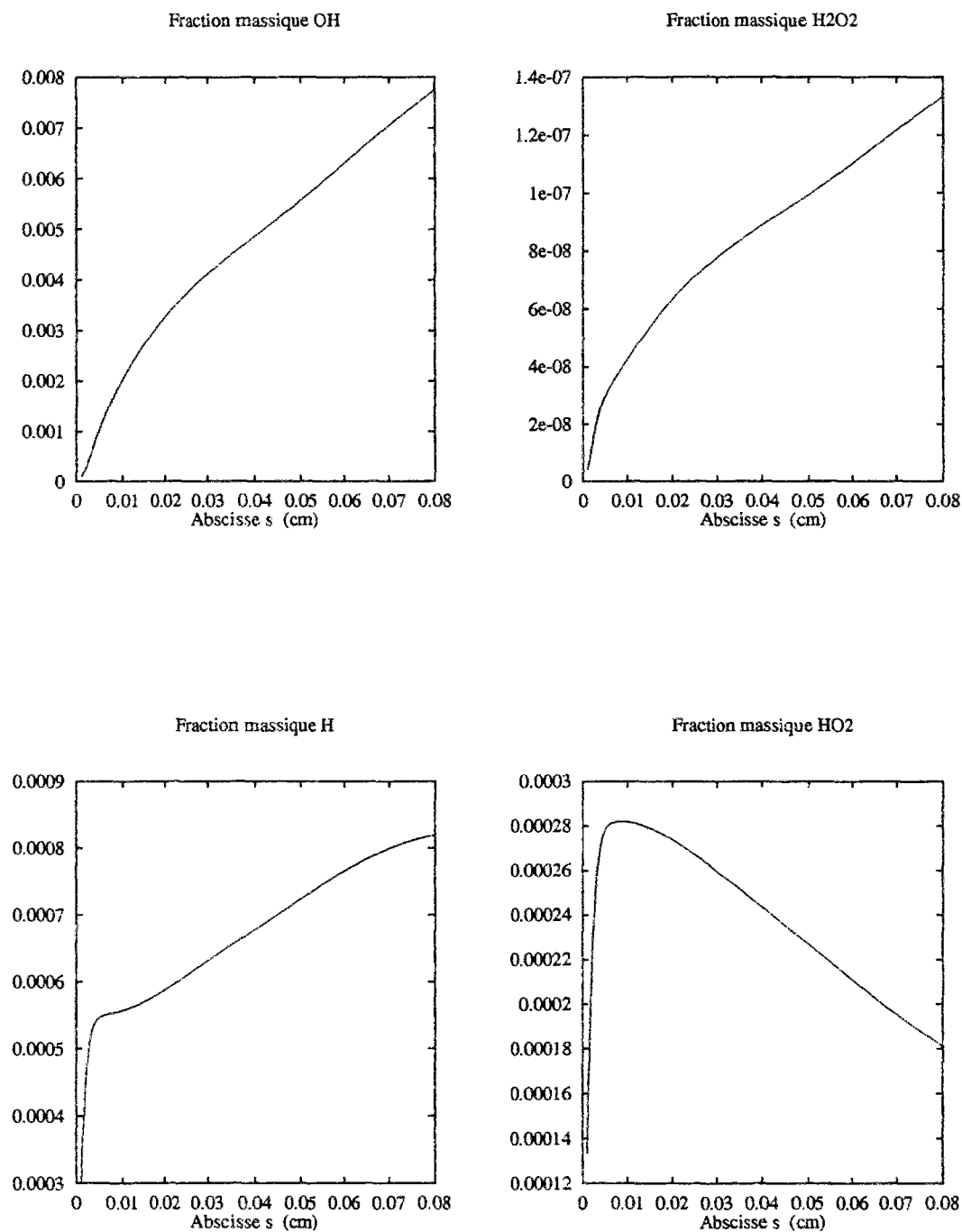


FIG. 1.25 - Cas état 3 "brûlé": évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}

stable comportant une onde de choc oblique suivie d'une combustion n'était possible. Pour un nombre de Mach incident $M > M^*$, nous avons également montré l'existence d'un angle de choc minimal $\varepsilon_{min}(M)$, correspondant à un angle de déflexion minimal $\delta_{min}(M)$ en dessous duquel ce type de configuration n'était pas possible. Nous avons pu observer numériquement le même type de comportement dans le cas où le modèle thermodynamique est plus fin, incluant des expressions polynomiales en température pour l'enthalpie du mélange gazeux. Nous avons également montré que, pour un nombre de Mach incident donné, il existe un angle de déflexion limite δ_{lim} au-dessus duquel une réflexion normale n'est plus possible : il se produit alors une réflexion dite de Mach. Ces mises en évidence numériques ont requis la détermination des polaires de choc exprimant les conditions aval au choc incident ainsi qu'au choc réfléchi, en fonction de l'angle de déflexion et du nombre de Mach incident, pour les deux modèles d'enthalpies affines et polynomiales. Finalement, nous avons pu estimer des bornes supérieures et inférieures pour la distance d'ignition effective à l'aval des chocs droit et quasi-droit, montrant que, dans une configuration stationnaire donnée, la flamme pouvait être très proche du point de rencontre des chocs.

Cette analyse simplifiée n'a bien sûr pas pu éclairer tous les points d'ombre de ce type de configuration : en particulier, les interactions choc-couche limite, ou choc-détente, les effets visqueux ou diffusifs, ou encore l'influence des conditions de sortie qui pourraient modifier la structure décrite, ne sont pas pris en compte.

Cependant, cette analyse phénoménologique offre l'intérêt de permettre de dimensionner au préalable une simulation bidimensionnelle pour une étude plus précise de l'effet de Mach [9].

Bibliographie

- [1] M.E. White, J.P. Drummond. A. Kumar, *Evolution and application of CFD techniques for scramjet engine analysis*, J. of Prop., **3**, 5, pp. 423-439, (1987).
- [2] M. Barrère, *La combustion supersonique : problèmes posés pour son développement*, L'aéronautique et l'astronautique, **123**, pp. 43-55, (1988).
- [3] P. Gastebois, *Contribution à l'étude des combustions stabilisées sur ondes de chocs*, Thèse de docteur-ingénieur, Université de Paris, (1969).
- [4] M. Barrère & A. Mestré, *Stabilisation de la flamme en combustion supersonique*, La Recherche Aérospatiale, **1**, p.1-13, (1988).
- [5] R. J. Kee, J. A. Miller & T. H. Jefferson, CHEMKIN: a general purpose, problem-independent, transportable, FORTRAN chemical kinetics code package, SANDIA Report SAND83-8209, (1983).
- [6] P. Deuflhard, E. Hairer & J. Zugck, *One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems*, Num. Math., **51**, pp. 501-516, (1987).
- [7] P. Deuflhard, *Recent Progress in Extrapolation Methods for Ordinary Differential Equations*, SIAM review, **27**, pp. 505-35, (1985).
- [8] Y. D'Angelo & B. Larrouturou, *Comparison and analysis of some numerical schemes for stiff complex chemistry problems*, Math. Mod. Num. Anal., (1994), à paraître (Rapport CERMICS 93-21, 1993).
- [9] Y. D'Angelo & B. Larrouturou, *A Fractional-Step Method for Stiff Exothermic Complex-Chemistry Problems applied to Supersonic Combustion Simulation*, en préparation.
- [10] R. Courant & K.O. Friedrichs, *Supersonic Flow and Shock Waves*, Interscience Publishers Inc, New-York, (1948).
- [11] R.D. McCarty, K.E. Cox & K.D Williamson, *Hydrogen : its technology and implications*, CRC Press, (1975).

- [12] D. Thévenin, *Dynamique de l'allumage des flammes de diffusion dans des écoulements cisailés*, Thèse de l'Ecole Centrale de Paris, p.143 (1992).
- [13] P. Deufhard, *Recent Progress in Extrapolation Methods for Ordinary Differential Equations*, SIAM review, **27**, pp. 505-35, (1985).

Chapitre 2

Comparaison et Analyse de Schémas Numériques pour la Résolution de Problèmes de Cinétique Chimique Complexe Raide

Ce travail fait l'objet d'un article en collaboration avec B. Larrouturou, à paraître dans la revue *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, sous le titre "Comparison and Analysis of some Numerical Schemes for Stiff Complex Chemistry Problems".

2.1 Introduction

Numerical solution of inviscid flows is now quite achievable: a good deal of efficient algorithms have appeared which make possible to solve the Euler equations of motion for most practical cases. For chemically reactive flows however, severe numerical difficulties may arise from the introduction of the highly non-linear chemical source terms – in particular when the number of species and of reactions is large – which generally lead to very stiff systems of differential equations.

In the case of hypersonic flows, the decomposition of the molecules of air (N_2 and O_2) only occur at very high temperature and the chemical phenomenon is globally endothermic. For this kind of chemical kinetics, a linearized implicit treatment of the chemical terms seems to be sufficiently efficient to solve the flow and does not affect the C.F.L. condition by more than a factor of two, even in the case of a complex chemistry model with 5 species and 18 reactions [2, 3, 8]. The extension of this method to a globally exothermic kinetic model, such

as the models arising in combustion, seems to lead to a very different – and highly unstable! – behaviour for this kind of linearized implicit methods. Moreover, numerical instability may sometimes appear even when non-linearized implicit methods are applied.

It is precisely the aim of our work to investigate how implicit schemes behave and perform when applied to kinetic models arising from complex chemical mechanisms. Indeed, although our ultimate objective is the solution of multi-dimensional reactive flows, we will concentrate here on the treatment of the reaction terms in a fractional step approach. After having briefly presented the flow equations, we will focus on the integration of the chemical source terms, which we will describe in detail in the next section. Then, we will describe various numerical methods, whose behaviours will be discussed and compared by examining three numerical experiments, for two models of the hydrogen-air combustion. These methods include the explicit Euler forward scheme, an explicit second-order Runge-Kutta scheme, linearized or nonlinear implicit schemes, with two formulations coupling or uncoupling the temperature and mass fractions, and two specialized O.D.E. solvers (LSODE and DASSL). The last section is then devoted to the numerical analysis of the linearized implicit schemes, for several simpler kinetic mechanisms, including a one-step reversible equation and two global reversible one-reaction models for the hydrogen-air combustion. In particular, these analyses will show why the linearized implicit schemes are adequate for endothermic regimes (typically for the air chemistry, in hypersonic re-entry flows), while they encounter extremely severe stability restrictions in exothermic situations, such as those arising in combustion.

2.2 Governing equations

2.2.1 The two-dimensional reactive Euler equations

We are interested in the numerical simulation of multi-dimensional high-speed reactive flows, such as those occurring in hypersonics, supersonic combustion or detonations. Neglecting therefore the viscous and diffusive effects, we start from the following conservative form of the κ -components two-dimensional “reactive Euler” equations: given by :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho_k)_t + (\rho_k u)_x + (\rho_k v)_y = \Omega_k(T, Y, \rho) , \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + P)_x + (\rho uv)_y = 0 , \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + P)_y = 0 , \\ e_t + (u(e + P))_x + (v(e + P))_y = 0 , \end{array} \right. \quad (2.1)$$

with $\rho_k = \rho Y_k$, Y_k being the mass fraction of species χ_k and Y the vector of the Y_k 's; Ω_k is the chemical source term for the k -th species. The other notations are usual.

To close the system, we write two additional equations. The first one is the perfect gas law:

$$P = \sum_{k=1}^{\kappa} \rho_k \frac{RT}{M_k}, \quad (2.2)$$

and the second one is the equation of state giving the energy:

$$e = \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + \rho h(T, \rho_k) - P. \quad (2.3)$$

We will be more specific later about the precise form of the specific enthalpy $h(T, \rho_k)$ for the κ -components real-gas mixture.

We can also write the system in its classical vector form:

$$W_t + F(W)_x + G(W)_y + H(W) = 0, \quad (2.4)$$

with:

$$W = \begin{pmatrix} \rho_k \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{pmatrix}, \quad F(W) = \begin{pmatrix} \rho_k u \\ \rho u^2 + P \\ \rho u v \\ u(e + P) \end{pmatrix}, \quad G(W) = \begin{pmatrix} \rho_k v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + P \\ v(e + P) \end{pmatrix}, \quad H(W) = \begin{pmatrix} -\Omega_k \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

We consider the solution of system (2.4) using semi-implicit upwind finite-volume methods. Semi-implicit means here that the convective (i.e., non reactive) part of the system is solved using a cheap explicit solver, whereas the reactive terms are integrated point-wise with a (preferably) implicit method. We write the global scheme as:

$$Area(C_i) \frac{W_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} + \sum_{j \in \Lambda_i} \phi_{ij}(W_i^n, W_j^n, \vec{\eta}_{ij}) + \frac{Area(C_i)}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = 0. \quad (2.6)$$

Here, the superscripts n and $n+1$ refer to the number of time steps, Δt is the time step, $Area(C_i)$ is the value of the area of the cell C_i , Λ_i is the set of neighbour nodes of vertex i , Lastly, ϕ_{ij} is the numerical flux between cells C_i and C_j ; it depends on the two states W_i^n and W_j^n and on the integrated normal on the cell interface $\vec{\eta}_{ij} = \int_{C_i \cap C_j} \vec{\nu}_i d\sigma$. We evaluate these numerical fluxes for the real-gas mixture using an explicit second-order accurate multi-component Riemann solver, which has the property of preserving the maximum principle for the mass fractions. We refer to e.g. [1, 7] for a complete description of such numerical methods.

To be more specific, we have to consider the different possible ways of evaluating the integral $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt$. For instance, if we wimply set $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = \Delta t H(W_i^n)$, we obtain a fully explicit scheme. But the timestep limitation for such an explicit scheme is usually very drastic in the presence of complex chemistry. This is why we have to consider semi-implicit schemes. On the other hand, writing $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = \Delta t H(W_i^{n+1})$ leads to a nonlinear system in which all variables (at all nodes) are fully coupled. In order to avoid

the cost of such an approach, we will consider instead a fractional step method, where the fluid-mechanics and the reactive part of the system are solved separately. We write the two steps as:

$$\begin{cases} \text{Area}(C_i) \frac{\bar{W}_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} + \sum_{j \in \Lambda_i} \phi_{ij}(W_i^n, W_j^n, \vec{\eta}_{ij}) = 0, \\ W_i^{n+1} - \bar{W}_i^{n+1} + \int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = 0, \end{cases} \quad (2.7)$$

This fractional step approach does not match the physical coupling between chemistry and fluid mechanics into the same time step, but seems to be a quite cheap method to compute stationary and unstationary chemically reacting flows.

In the sequel, concentrating on the second chemical step, we examine and compare various possible schemes for the integration of the chemical source terms.

2.2.2 One-cell model

The new system to be solved now is a system of algebraic-differential equations consisting of the κ ordinary differential equations of chemical kinetics for the mass fractions and of the conservation of energy. The unknowns are the temperature T and the vector of mass fractions Y . The system can be written as:

$$\begin{cases} \frac{dY_k}{dt} = \frac{\Omega_k(T, Y, \rho)}{\rho} = \omega_k(T, Y), \quad \text{for } k = 1, \dots, \kappa \\ \epsilon(T, Y) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T) = \text{Constant}. \end{cases} \quad (2.8)$$

Notice that ρ is constant in the first equation of (2.8). Note also that we use the equation of conservation of energy in its integral form and not in its differential form $C_v \frac{dT}{dt} = - \sum_{k=1}^{\kappa} \omega_k \epsilon_k(T)$,

with $C_v = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k C_{vk}$.

We now have to write in details the reactions terms appearing in (2.8). We consider that the composition of the mixture of κ gaseous species is influenced by I reversible chemical reactions, which we write as:

$$\sum_{k=1}^{\kappa} \nu'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{\kappa} \nu''_{ki} \chi_k, \quad (2.9)$$

for $1 \leq i \leq I$. The source terms Ω_k are given by:

$$\Omega_k = \sum_{i=1}^I W_k \nu_{ki} \mathcal{R}_i, \quad (2.10)$$

where $\nu_{ki} = (\nu''_{ki} - \nu'_{ki})$, W_k being the molecular weight of species χ_k , and where \mathcal{R}_i denotes the global advancement rate of the reaction i .

The reaction rate of the i -th reaction is then given by:

$$\mathcal{R}_i = K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}}, \quad (2.11)$$

where $N_k = \frac{\rho Y_k}{W_k}$ is the molar concentration of species χ_k . For third-body reactions (see Appendix B), the expression for \mathcal{R}_i is modified as:

$$\mathcal{R}_i = B_i \left(K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}} \right), \quad (2.12)$$

where $B_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \alpha_{ki} N_k$; the α_{ki} 's are the third-body-efficiency coefficients of species χ_k for the reaction i .

The forward and reverse reaction rates $K_{f,i}$ and $K_{r,i}$ are given by:

$$K_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad K_{r,i} = \frac{K_{f,i}}{K_{c,i}}, \quad (2.13)$$

where E_i is the activation energy of the forward reaction, and where $K_{c,i}$ is the *equilibrium constant* for reaction i . These “constants” are given by the following expressions:

$$K_{c,i} = \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\Delta \nu_i} \exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT}\right), \quad (2.14)$$

where:

$$\Delta \nu_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki}, \quad \Delta S_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} S_k^0(T), \quad \Delta H_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} H_k^0(T), \quad (2.15)$$

and where P_{atm} is the value in Pascals of the atmospheric pressure: $P_{atm} = 101325$.

In (2.15), $S_k^0(T)$ and $H_k^0(T)$ respectively denote the standard-state molar entropies and enthalpies for species k ; they are approximated using the relations:

$$\frac{S_k^0(T)}{R} = a_{1k} \ln T + a_{2k} T + \frac{a_{3k}}{2} T^2 + \frac{a_{4k}}{3} T^3 + \frac{a_{5k}}{4} T^4 + a_{7k}, \quad (2.16)$$

$$\frac{H_k^0(T)}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T + \frac{a_{3k}}{3} T^2 + \frac{a_{4k}}{4} T^3 + \frac{a_{5k}}{5} T^4 + \frac{a_{6k}}{T}, \quad (2.17)$$

where the a_{lk} coefficients are two sets of constants given for two intervals of temperatures, the “upper” and the “lower” intervals, corresponding respectively to $T \geq T_{MID}(k)$ and $T \leq T_{MID}(k)$. We use the CHEMKIN Fortran library [26] to compute all these thermodynamic data. The CHEMKIN package also allows us to easily change the chemistry kinetic model (see Appendix B).

Lastly, the specific energy $\epsilon(T, Y) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T)$ is evaluated from the relations:

$$\epsilon_k(T) = \frac{H_k^0(T) - RT}{W_k}, \quad (2.18)$$

where the molecular enthalpy $H_k^0(T)$ of species χ_k is given by (2.17).

2.3 Numerical experiments

We will now consider several numerical methods for the solution of system (2.8), and compare them on three typical numerical experiments.

We will see that the crucial point in all experiments, and for all methods, is the choice of the local time step. In the numerical investigation presented here, we made this choice *a priori* in a semi-empirical manner; indeed, for the complete system (2.6), one ideally wishes to take for the chemistry the time step coming from the stability criterion of the explicit finite-volume method for the fluid, so as to avoid evaluating the own characteristic time for the complex chemical mechanism. But we will see that many difficulties remain, and in fact that several of the methods under consideration behave very poorly for the hydrogen-air combustion test case investigated below. Nevertheless, we found it necessary to present these numerical results before we perform a detailed analysis of the numerical stability of some of the schemes for some model situations in the next section.

For some stability reasons (see [1] for the details), we slightly modify the system (2.8) in our experiments below: we impose the conservation of enthalpy instead of imposing the conservation of energy. In fact, this modification does not qualitatively affect the results which will be presented and discussed below.

2.3.1 The numerical methods

We begin by describing the methods in some details.

We will mainly consider implicit methods. The differences between the various methods considered here lie in the size of the vector of unknowns. The first method is simply Newton's method on the whole system (2.8), i.e. with T and Y as simultaneous unknowns. In other words, we write (2.8) as:

$$\begin{cases} C_1(X^{n+1}) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k^{n+1} \epsilon_k(T^{n+1}) - h_0 = 0, \\ C_{k+1}(X^{n+1}) = Y_k^{n+1} - \Delta t \omega_k(T^{n+1}, Y^{n+1}) + Y_k^n = 0, \end{cases} \quad (2.19)$$

with:

$$X^{n+1} = \begin{pmatrix} T^{n+1} \\ Y_1^{n+1} \\ \vdots \\ Y_{\kappa}^{n+1} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

and $h_0 = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k^0 h_k(T^0)$. The Newton iterations may then be written as:

$$G^{\alpha} \Delta X^{\alpha} = -C(X^{\alpha}), \quad (2.21)$$

where $G^\alpha = \left(\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial X}\right)^\alpha$ and $\Delta X^\alpha = X^{\alpha+1} - X^\alpha$, with $X^{\alpha=0} = X^n$ and $X^{n+1} = X^{\alpha=\alpha_{max}}$. The dimension of the unknown vector is $\kappa + 1$, and the linear system is inverted at each iteration by a direct GAUSS method. The Jacobian matrix G is exactly computed at each iteration from its analytical expression (see Appendix A). In practice, we limit the number of Newton iterations to ten, in order to obtain a not too expensive method: we will call this method “coupled Newton” method (CN). If we choose $\alpha_{max} = 1$, we obtain the “coupled linearized” implicit method (CL).

We can also slightly change this approach and uncouple the mass fractions system from the energy equation in the resolution. We then only make Newton iterations on the mass fractions and solve separately for the temperature by another scalar Newton method on the energy equation. More precisely, we then write the mass fractions equations as:

$$\mathcal{U}_k(Z^{n+1}) = Y_k^{n+1} - \Delta t \omega_k(T^n, Y^{n+1}) + Y_k^n = 0, \quad (2.22)$$

with:

$$Z^{n+1} = \begin{pmatrix} Y_1^{n+1} \\ \vdots \\ Y_\kappa^{n+1} \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

We now write the vector Newton iterations as:

$$J^\alpha \Delta Z^\alpha = -\mathcal{U}(Z^\alpha), \quad (2.24)$$

with $J^\alpha = \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial Z}\right)^\alpha$, $\Delta Z^\alpha = Z^{\alpha+1} - Z^\alpha$, $Z^{\alpha=0} = Z^n$ and $Z^{n+1} = Z^{\alpha=\alpha_{max}}$, and the new temperature T^{n+1} is then computed by substituting the new mass fractions Y_k^{n+1} into the energy equation:

$$\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k^{n+1} h_k(T^{n+1}) - h_0 = 0, \quad (2.25)$$

and solving it by a scalar Newton method. Limiting α to $\alpha_{max} = 10$, we call this method the “uncoupled Newton” method (UN). Again, if we take $\alpha_{max} = 1$, we simply obtain a linearized implicit method, called the “uncoupled linearized” method (UL).

This uncoupled formulation allows us to also consider explicit methods. We will consider both the forward Euler method and an explicit two-stage Runge-Kutta (RK2) method, namely Gill’s method (see [12] and Appendix C for more details). But these methods will be *a priori* the “worst” methods in terms of time step limitation.

Lastly, we can also use for the solution of (2.8) an O.D.E. solver as a (quasi) black box – and the most popular one seems to be LSODE [5] – for the mass fractions equations, with a one-variable Newton method for the temperature equation, as in the above “uncoupled” approaches. Or, in a very similar manner, we can solve the whole system with an Algebraic-Differential-Equations solver – like DASSL [9], for example.

Let us simply recall some features of the method used in LSODE. For the system of ordinary differential equations $\dot{y} = f(t, y)$, LSODE uses a backward differentiation formula $y_n = \sum_{j=1}^q \alpha_j y_{n-j} + \Delta t^n \beta_0 f(t^n, y^n)$; q is the order of accuracy of the method ($1 \leq q \leq 5$). The solution of the resulting non-linear system is computed by modified Newton iterations, where the Jacobian matrix (either exact and supplied by the user or approximated by internal difference quotients) is held constant during the iterations. The whole efficiency of the package mainly relies on the optimization of the local time step, which involves quite numerous failure tests and feedbacks. In particular, the initial time step is essentially determined by the constraint (see [5]):

$$\left\| \frac{h^2}{2} \ddot{y} \right\|_{WRMS} = 1, \quad (2.26)$$

with the norm $\|v\|_{WRMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\frac{v_i}{\epsilon_i}\right)^2}$, the numerical tolerances ϵ_i 's being supplied by the user.

Let us finally emphasize that, for all numerical experiments described below, we always use the values from the previous time step as initial guess for the Newton method.

2.3.2 The test-case: hydrogen-air combustion

In all numerical experiments below, we consider the combustion of a homogeneous mixture of hydrogen and air. The initial molar fractions are assumed to be:

$$X(H_2) = X(O_2) = \frac{1}{5.79}, \quad X(N_2) = \frac{3.79}{5.79}, \quad (2.27)$$

and zero molar fractions for all other species. The initial values of temperature and pressure are $T_i = 1615 \text{ K}$, $P_i = 0.4 \text{ atm}$. These values may be seen as typical initial values behind the shock when studying shock-induced hydrogen-air combustion, for instance in scramjets configurations. The numerical tests use two kinetic models, given in Appendix B; the first mechanism involves 9 species and 19 reactions (referred as the 9-19 model in the sequel), the second one involves 10 species and 16 reactions (10-16). The final equilibrium temperature is equal to 2637 K for both models. We assume that the mixture combustion has reached its equilibrium before time $t_{max} = 10^{-4} \text{ s}$, which has been taken as the final time of our calculations.

We should keep in mind in the sequel that we have chosen here a quite severe test-case. It will indeed appear that most numerical methods behave much better for globally endothermic chemical mechanisms (such as the kinetic model describing the air chemistry) than for exothermic chemistries; moreover, among the exothermic mechanisms, the combustion of hydrogen is more explosive and exothermic than the combustion of heavier hydrocarbons.

2.3.3 First numerical experiment

As a first numerical experiment, we solve the above test-case with all methods presented in Section 2.3.1, using the following simple strategy for choosing the variable time step.

As already said, the time step cannot be chosen in an arbitrary way, since some of the methods suffer from severe stability condition (see Section 2.4). Here, we choose to reduce the time step during the calculation, i.e. while the temperature increases, in the following simple and crude way. For all methods (except for LSODE and DASSL which evaluate their own time steps), we take the initial time step to be $\Delta t_0 = 10^{-9}$ s. Then, for several values θ_l of the temperature, we simply multiply the initial time step Δt_0 by some factor ϵ_l when the temperature T is exceeding the value θ_l . The values of θ_l and ϵ_l are chosen to be *a priori* the same for all methods (after having tried quite a number of values...) and are equal to:

θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	θ_6	θ_7	θ_8
1650	1700	1800	1900	1950	2000	2100	2200
ϵ_{θ_1}	ϵ_{θ_2}	ϵ_{θ_3}	ϵ_{θ_4}	ϵ_{θ_5}	ϵ_{θ_6}	ϵ_{θ_7}	ϵ_{θ_8}
0.2	0.1	0.05	0.02	0.01	0.005	0.001	0.0005

Moreover, these empirical values can be changed during the numerical calculation: whenever the code crashes, the current value of ϵ_l is then divided by two and the calculation proceeds.

The numerical results obtained in this way are very similar for all methods (the plotted profiles are undistinguishable) and accurate. The time evolution of the temperature for both 9-19 and 10-16 chemistry models, presented on Figure 2.1, shows that the equilibrium temperature is reached slightly earlier with the 10-16 mechanism than with the 9-19 model. The mass fractions profiles are shown on Figure 2.2 for the 9-19 model, and on Figure 2.3 for the 10-16 mechanism (for the latter, we have omitted the H_2 and O_2 profiles, which look very much like those on Figure 2.2, but for the shorter equilibrium time). Notice that, for the 10-16 model, the species N_2 and NO have not reached equilibrium at the final time 10^{-4} s.

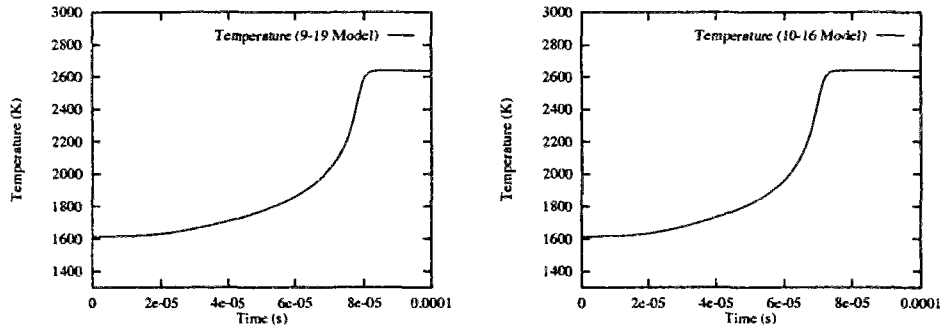


FIG. 2.1 - Temperature evolution for both 9-19 and 10-16 models.

But the most important output of this experiment concerns the comparison of the numbers of time steps and of the CPU times needed by each of the methods. These figures are given in

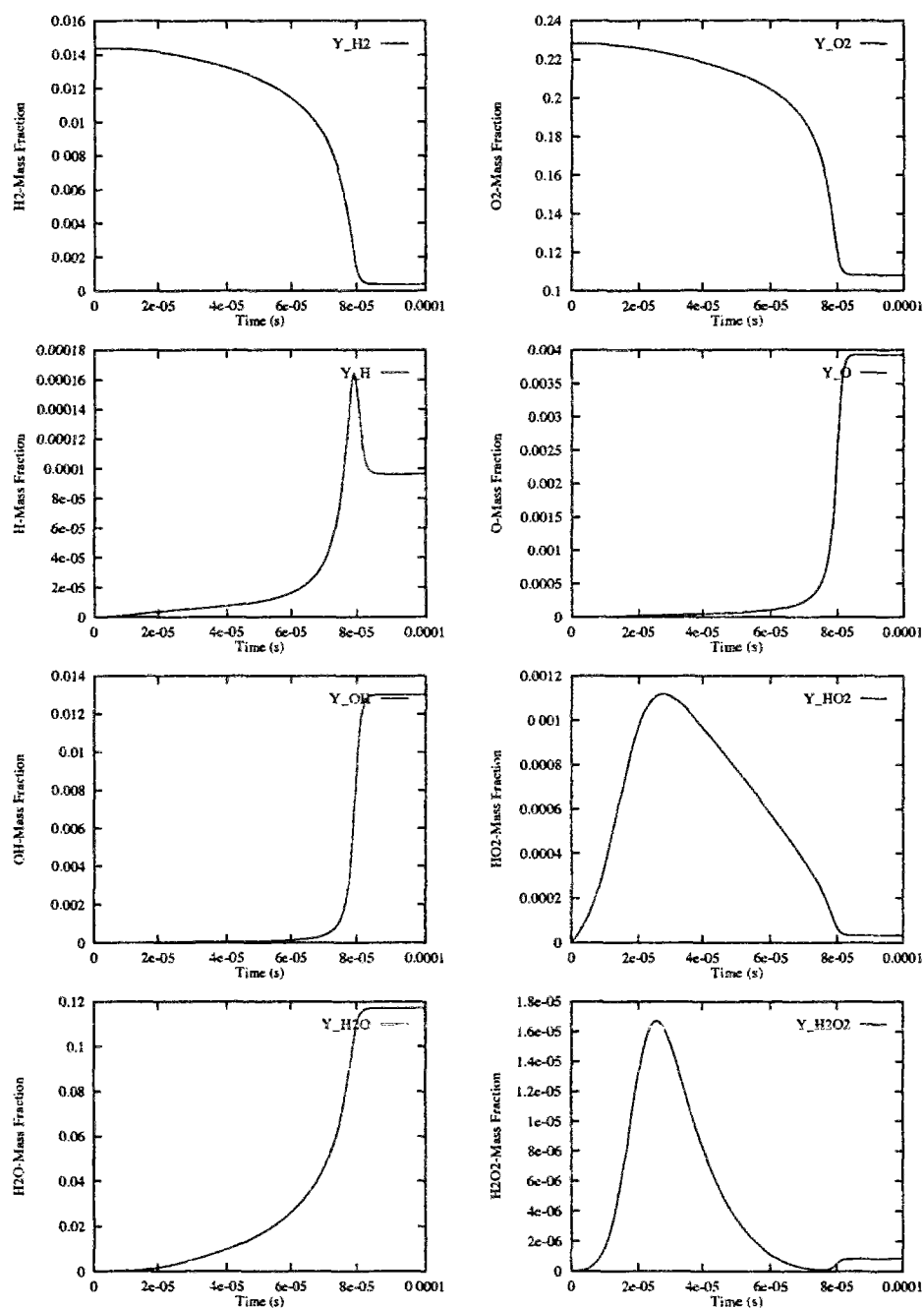


FIG. 2.2 - Mass fractions evolution for the 9-19 model.

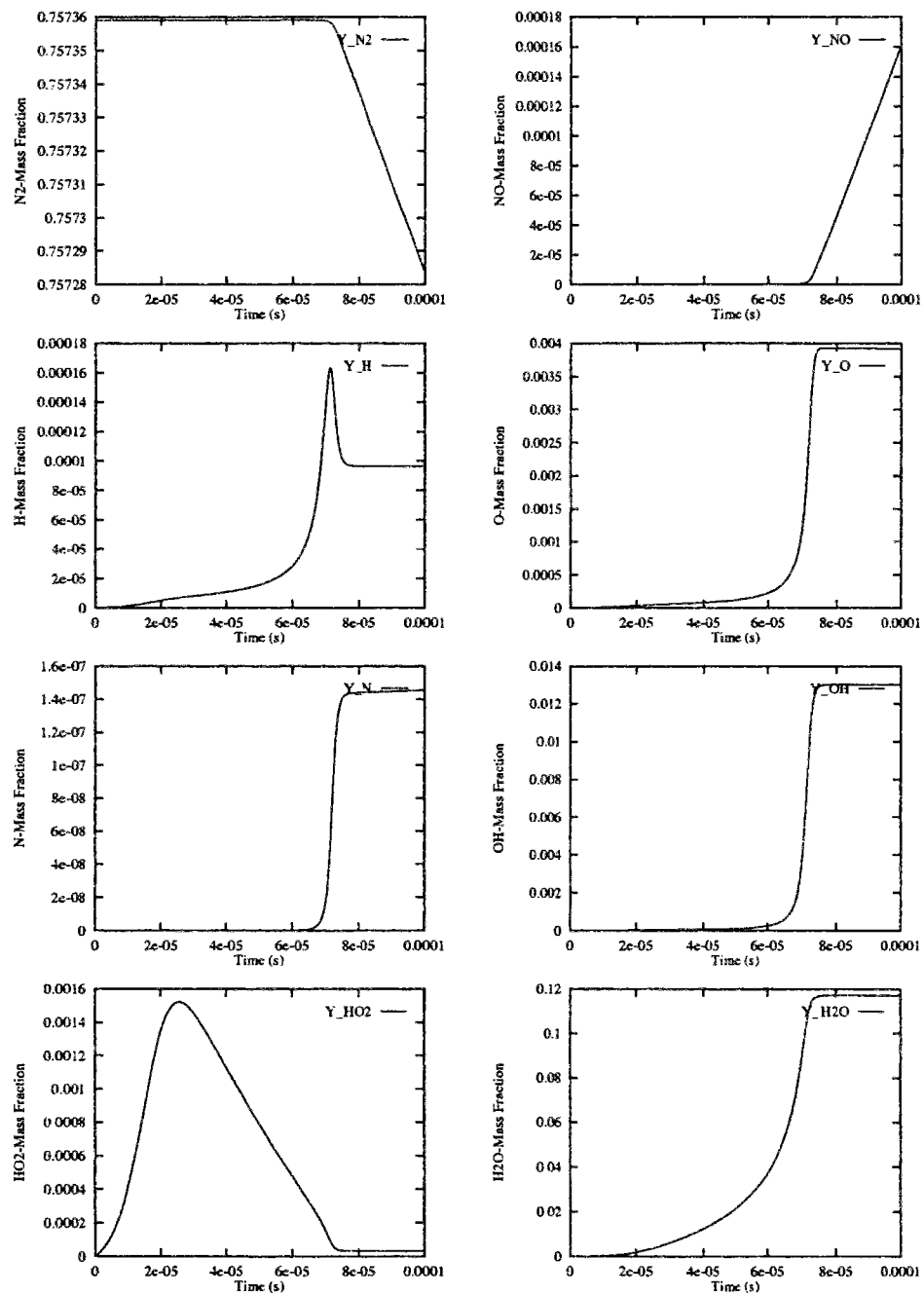


FIG. 2.3 - Mass fraction evolution for the 10-16 model.

the Table below, and are particularly dramatic (the calculations were performed on an IBM RS-6000 560 computer)!!

Methods	CPU time	Number of iterations
RK2	17 h	$2.6 \cdot 10^8$
UL	1 h 30 mn	$2.6 \cdot 10^6$
CL	11 h 30 mn	$3 \cdot 10^7$
UN	50 h (!)	$8 \cdot 10^7$
CN	> 100 h (!!!)	> $1 \cdot 10^8$
LSODE	0.5 s	144
DASSL	0.7 s	121

These results deserve several comments. First, they show undoubtedly that only the specialized O.D.E. and D.A.E. solvers LSODE and DASSL can be used efficiently for such a complex and stiff chemistry problem. Notice however that the above results do not bring any definite conclusion for the comparison of LSODE and DASSL for this problem: the performances of both methods are very close; moreover, when we also tried LSODE and DASSL methods on a SUN SS10 computer, their respective CPU times were 1.08 s for LSODE and 0.86 s for DASSL: the relative performances of LSODE and DASSL are therefore machine-dependent.

Besides, all other methods behave very poorly. We may also say that the linearized implicit methods seem (in each case, either coupled or uncoupled) to be less unstable than the Newton method, and also that uncoupled methods seem to give better results than coupled ones. But the main conclusion is certainly that all these methods need a considerable CPU time!

Before turning to our second numerical experiment, we should emphasize again two facts. On one hand, the above results are very far from being optimal, because we used a very poor strategy for adjusting the local time step; much better results will indeed be obtained in our third experiment below. On the other hand, it is worth to keep in mind that our sole criterion for diminishing the time step in this experiment was the crash of the code. We could have decided to decrease Δt whenever one of the mass fraction(s) was becoming negative (this actually happened during the calculation, but very slightly ($\sim 10^{-7}$ in absolute value for the greater ones); the code crashed when more negative values were appearing). We will see in the next experiments that forcing the mass fractions to remain non negative would have led to quite different results.

2.3.4 Second numerical experiment

We now investigate more closely the size of the time step with which each of the methods can adequately operate. In our second experiment, we are going to determine, for each method except LSODE and DASSL (but adding the forward Euler explicit method), and for both 9-19 and 10-16 kinetic models, the maximal time step required so as to ensure that all mass fractions

stay in the interval $[0, 1]$. This will be done for an initial pressure equal to the atmospheric pressure, and for an initial temperature increasing from 1300 K to 2300 K with a step of 20 K.

We will consider two different initial compositions. First, we take the same initial composition as in the above section, i.e. with zero mass fractions for species other than H_2 , O_2 and N_2 . We will call this initial condition “zero composition” and the maximal allowed time step will be denoted $\Delta t_{Y=0}^+$. Secondly, we leaded the same calculation by initiating the mass fractions with the values calculated by LSODE at the time $t = 10^{-6}\tau$, where τ is the ignition delay at the considered temperature; this initial condition will be called “non-zero composition”, and the corresponding maximal time step is denoted $\Delta t_{Y>0}^+$. Let us make precise that we call here “ignition delay” the time where the temperature profile changes its curvature (i.e. the inflexion point), starting from the zero-composition mixture; this is a characteristic time for the combustion of this mixture at a given temperature (see Figure 2.4).

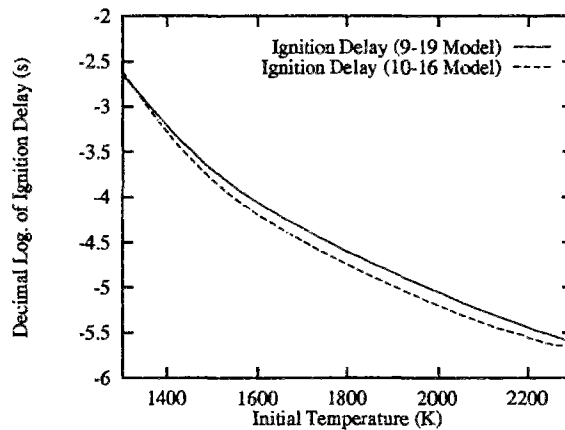


FIG. 2.4 - Ignition delay as a function of the initial temperature.

The results are presented on Figures 2.5 to 2.10.

These results show for instance that using the “non-zero” initial mass fractions does not necessarily increase the maximal usable time step, as we could expect: we sometimes have $\Delta t_{Y=0}^+ > \Delta t_{Y>0}^+$ (and even $\Delta t_{Y=0}^+ \gg \Delta t_{Y>0}^+$ for the UN method).

But the most interesting result is that the initial time step $\Delta t_{Y=0}^+$ actually vanishes to zero (with machine accuracy) at some initial temperatures for some of the implicit methods (CL, UL and CN, for both chemistry models). In other words, for this (not so particular!) initial condition, these methods *can never lead to non-negative mass fractions* for this hydrogen-air combustion process. Moreover, the improvement brought by using the “non-zero composition” is absolutely not sufficient in several cases, since $\Delta t_{Y>0}^+$ is highly oscillating with the temperature; this is true for the CL and CN methods on the 10-16 model. For most methods, the 9-19 mechanism gives worse results than the 10-16 model for the “zero composition”, but the advantage from using the “non-zero” initial mass fractions seems bigger.

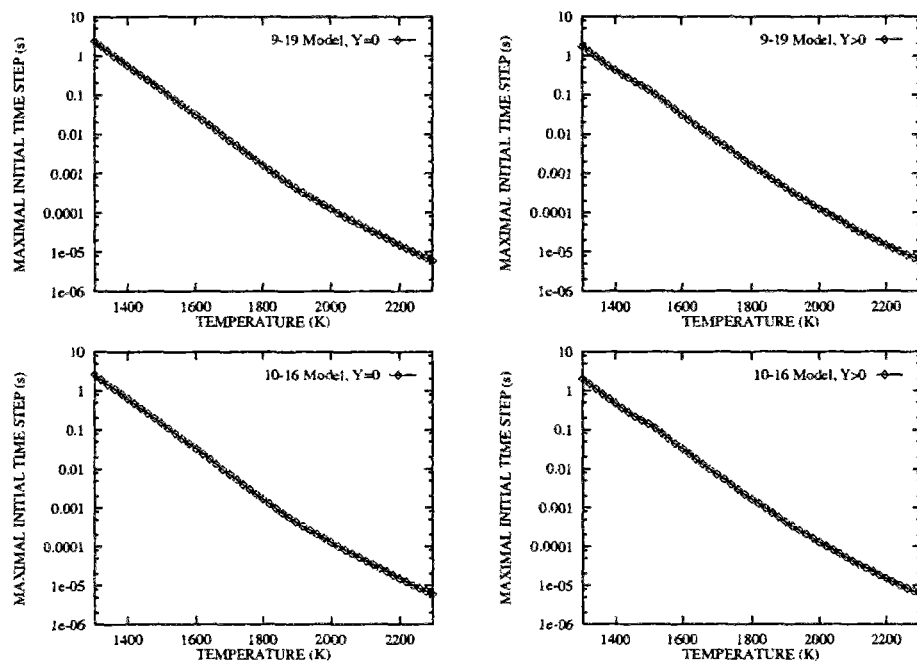


FIG. 2.5 - Maximal time steps for the first-order explicit method.

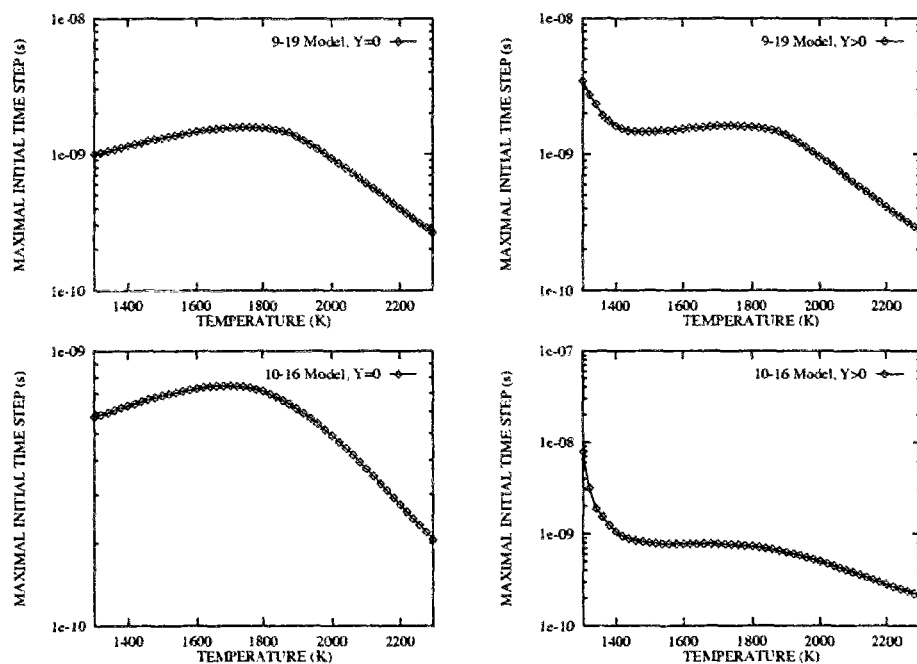


FIG. 2.6 - Maximal time steps for the RK2 method.

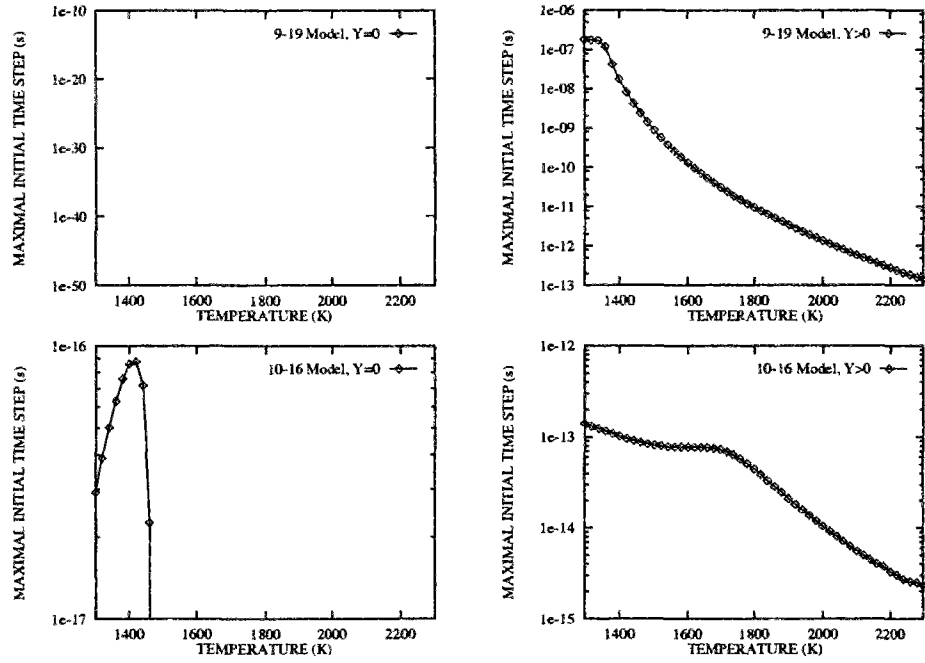


FIG. 2.7 - Maximal time steps for the UL method.

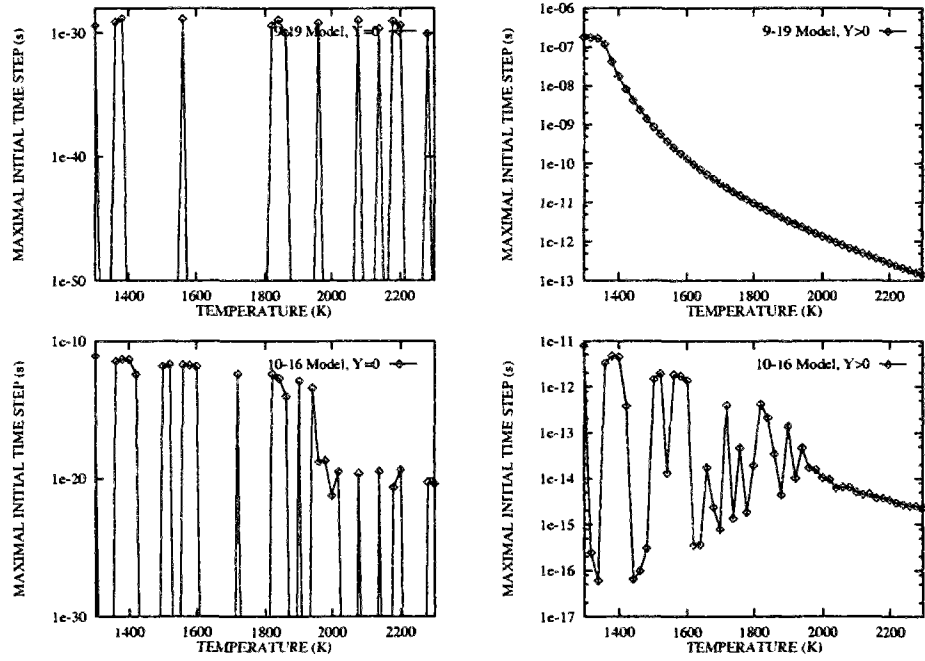


FIG. 2.8 - Maximal time steps for the CL method.

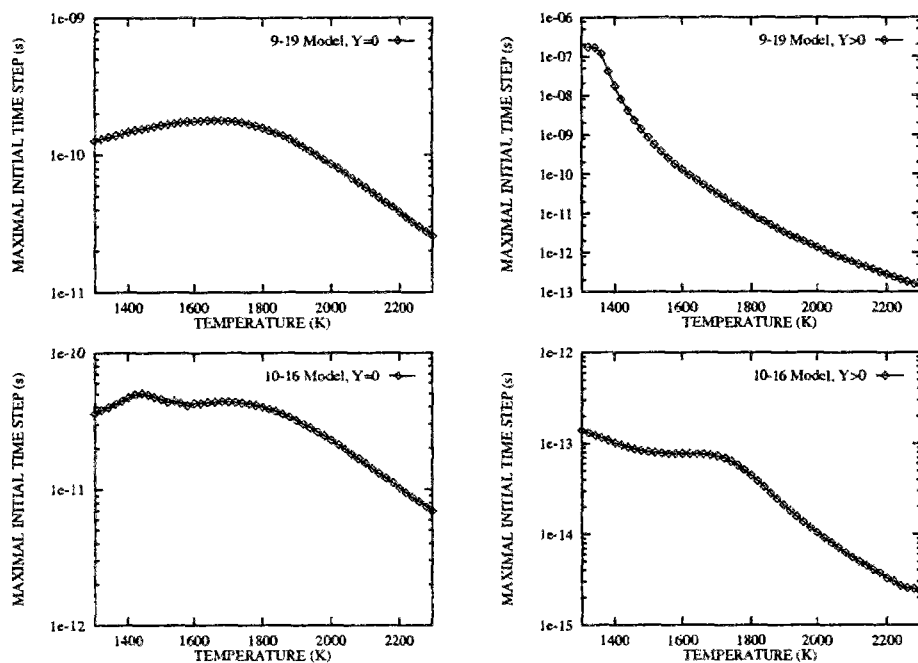


FIG. 2.9 - Maximal time steps for the UN method.

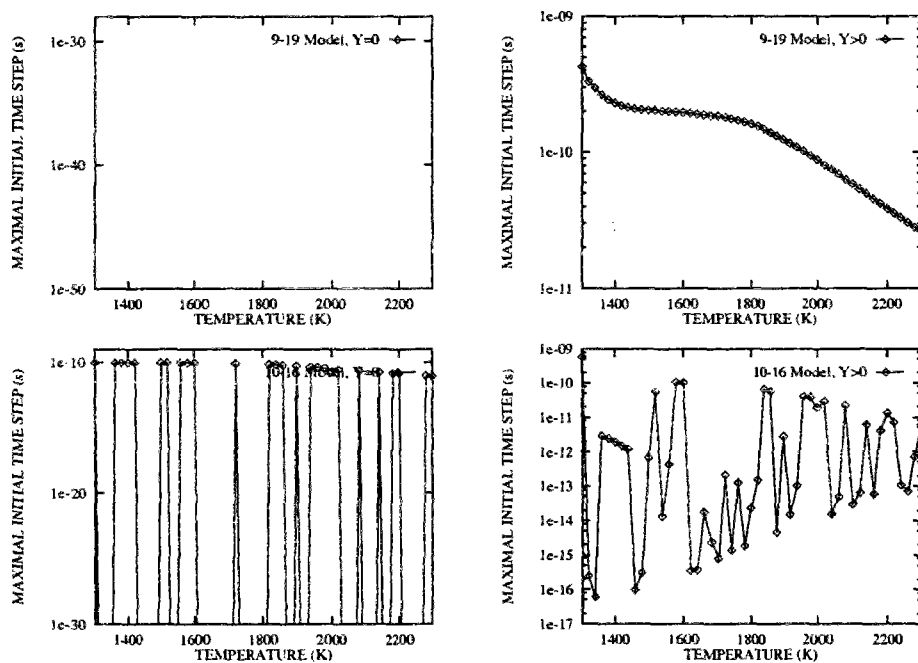


FIG. 2.10 - Maximal time steps for the CN method.

Another paradoxical result lies in the fact that the first-order explicit and explicit RK2 methods have the larger allowed time step!! In fact, this is not too surprising since our choice of the time step only demands that mass fractions stay between 0 and 1, but does not necessarily give physically reasonable results (see our third experiment below).

Also, we need to add that, if instead of imposing non-negative mass fractions, we were requiring mass fractions “not too far” from the interval $[0, 1]$ (and above all that the code does not crash, as in our first experiment), the linearized implicit methods would appear to allow larger time steps than the explicit or Newton methods. In all cases, we must admit that the Newton methods again behave surprisingly poorly.

2.3.5 Third numerical experiment

For our last experiment, we again consider the test-case of Section 2.3.2. But we will use a more elaborate strategy for choosing the variable time step, while imposing the mass fractions to stay between 0 and 1. We carried out these calculations only for the 9-19 model (which seems harder than the 10-16 one, at least at the beginning of the computation, from the previous section).

Our (empirical) time step strategy goes as follows: starting with a given value of Δt , we constantly check whether the mass fractions remain in the admissible interval. In case of failure, we multiply Δt by a coefficient $\alpha < 1$. But we may also increase the time step using some fixed integers N_l and coefficients $\beta_l > 1$, as follows: if the computation remains successful during N_l iterations, we then multiply Δt by β_l . Also, after $M > \max N_l$ successful iterations, we multiply Δt at each time step by a coefficient $\gamma > 1$.

For the first-order explicit and second-order explicit RK2 methods, the initial values of Δt , the values of N_l , α , β_l , M and γ are given in the Table below, together with the total number of iterations and the CPU time in seconds on an IBM RS-6000 560 computer (we always took $\beta_2 = \beta_3 = \beta_4$).

Methods	Initial Δt	α	N_1	β_1	N_2	N_3	N_4	β_2	M	$\gamma - 1$	Iter.	CPU
EXPL	$1.2 \cdot 10^{-9}$	0.9	15	1.002	100	500	1000	1.005	2000	$5 \cdot 10^{-5}$	790 000	260
RK2	$1.4 \cdot 10^{-9}$	0.9	15	1.02	100	500	1000	1.05	2000	0.01	835 000	1093
UN	$1.0 \cdot 10^{-11}$	0.9	15	1.002	100	500	1000	1.005	2000	$5 \cdot 10^{-5}$	2079 000	47323

In agreement with the previous section, the same experiment cannot directly be run with the UL, CL and CN methods, since $\Delta t_{Y=0}^+$ vanishes for these methods. Instead, we started with the “non-zero composition”, i.e. with the mass fractions obtained by LSODE at a time of $7.852 \cdot 10^{-11}$ seconds, corresponding to 10^{-6} times the ignition time of the reaction at $T = 1615$ K. The parameters and results of the calculation are given below:

Methods	Initial Δt	α	N_1	β_1	N_2	N_3	N_4	β_2	M	$\gamma - 1$	Iter.	CPU
UL	$1.0 \cdot 10^{-10}$	0.9	15	1.002	100	500	1000	1.005	2000	5.10^{-5}	753 000	3543
CL	$1.0 \cdot 10^{-10}$	0.9	15	1.002	100	500	1000	1.005	2000	5.10^{-5}	738 000	7422
CN	$1.0 \cdot 10^{-10}$	0.9	15	1.002	100	500	1000	1.005	2000	5.10^{-5}	Failure	

For the CN method, the calculation fails after 15500 iterations. The time step size required to conserve non-negative mass fractions first lies between 5.10^{-10} and 7.10^{-9} seconds, but then vanishes after time $t = 7.10^{-6}$ s. It seems hard to choose the initial composition so that the mass fractions never become negative.

The results of these calculations are shown on Figures 2.11 to 2.15. For each method, we show the evolution of the time step, and those profiles (of temperature and mass fractions) where some particularities can be remarked. Indeed, in most cases, the temperature and mass fractions profiles perfectly agree with those of the first experiment, i.e. are perfectly acceptable.

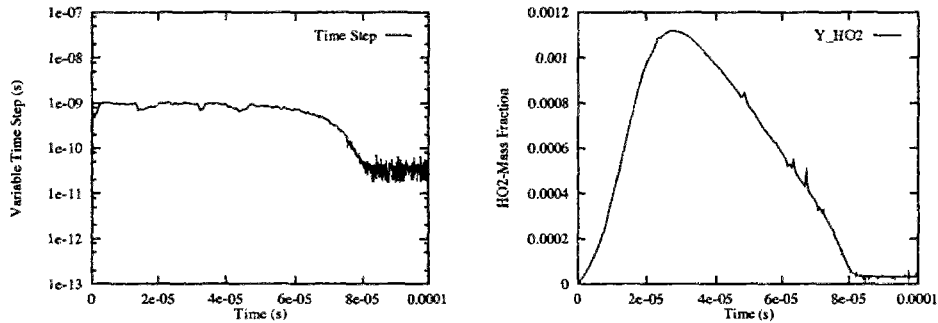


FIG. 2.11 - Variable time step and HO_2 mass fraction for the first-order explicit method.

The first comment is that these results have been obtained with much shorter computational times than in our first experiment, i.e. we have used bigger time steps on the average, while preserving the mass fractions positivity. The first-order explicit method performs surprisingly well; the linearized implicit methods, which need a little help (with the “non-zero” initialisation) to start the calculation, perform equally well in terms of time step size (and therefore worse in terms of CPU time). And again, the Newton methods perform very badly.

However, the results present in general some oscillations for the mass fractions, in particular for the rare species; therefore, requiring the mass fractions to remain non-negative does not insure accurate non oscillatory results. In particular, the results of the RK2 method are fully unacceptable! But a careful examination also shows that the results of the UN method (which are the most oscillatory among all other methods) are also false: we see indeed that the equilibrium temperature is reached much earlier than in the first experiment (this wrong result is probably due to the oscillations which are produced before the equilibrium on the mass fractions profiles).

It is also worth noticing a rather surprising fact: all methods see their variable time step decrease during the calculation, and highly oscillate when they reach equilibrium. As a conse-

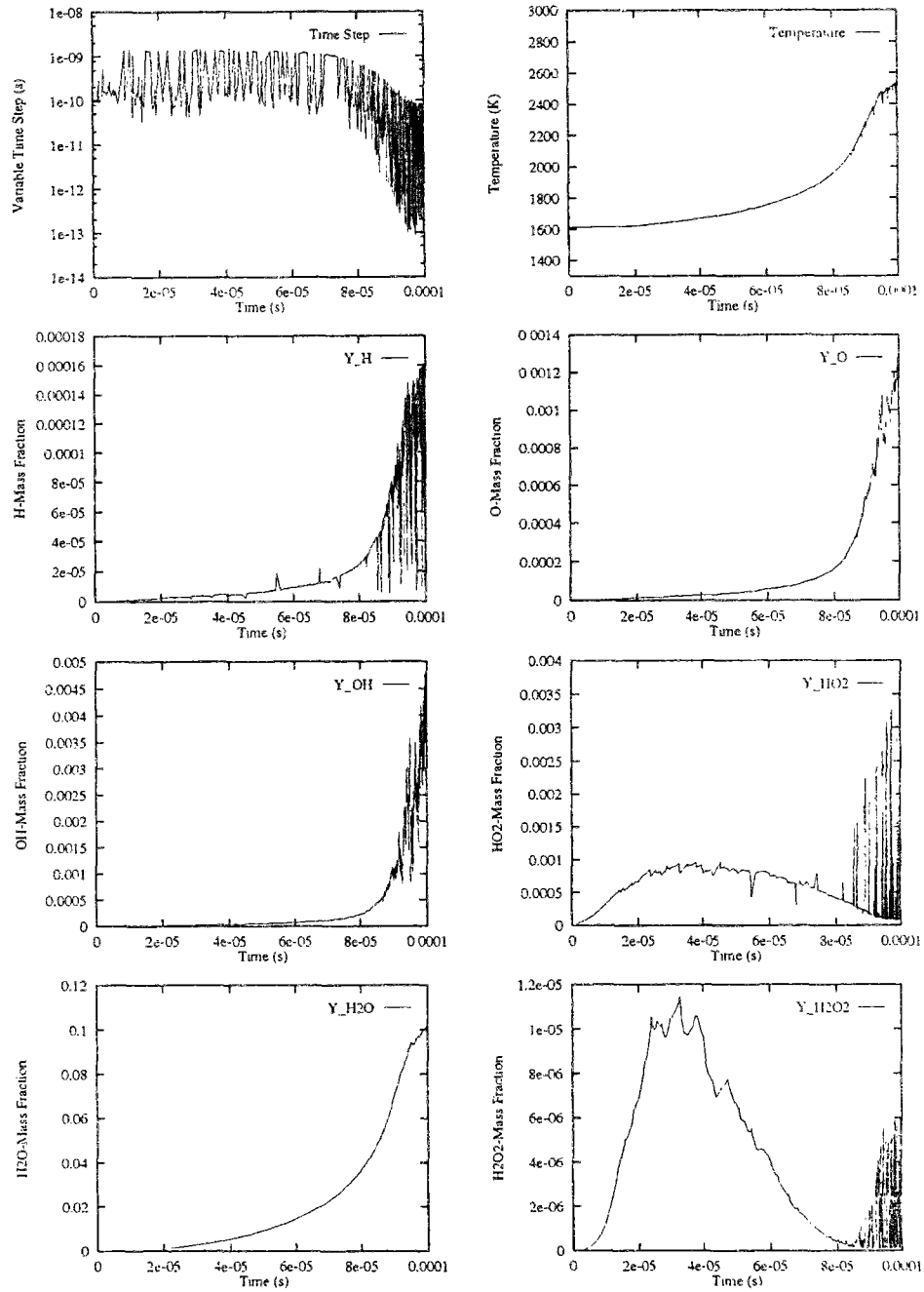


FIG. 2.12 - Variable time step, temperature and mass fractions profiles for the RK2 method.

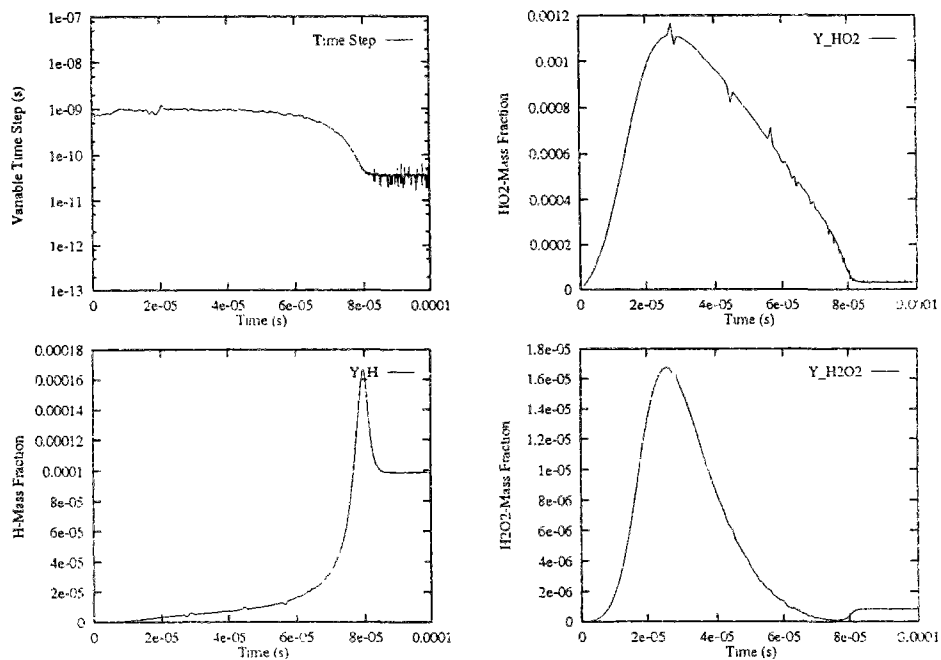


FIG. 2.13 - Variable time step and mass fractions profiles for the UL method.

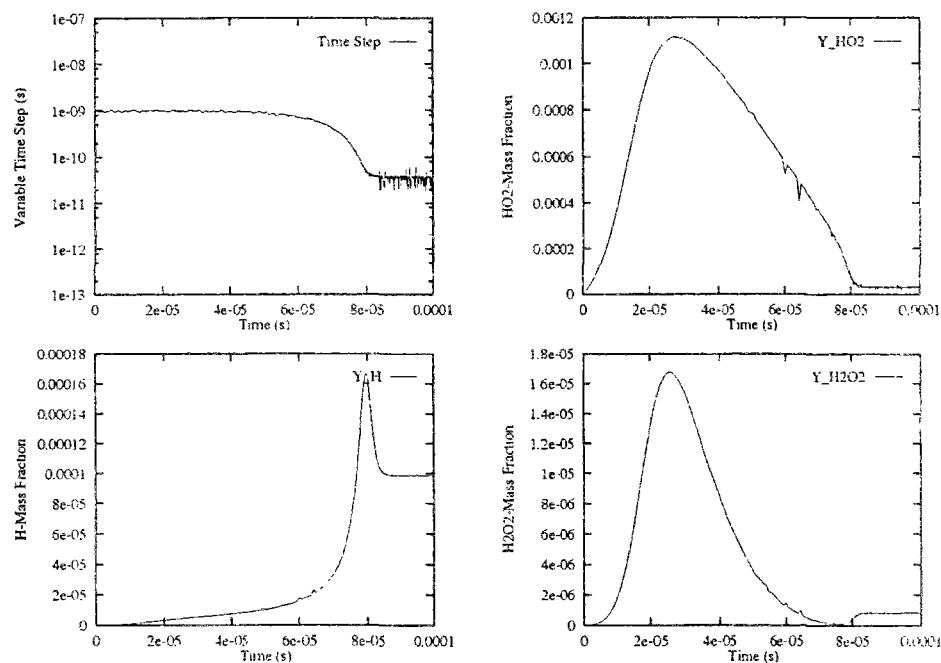


FIG. 2.14 - Variable time step and mass fractions profiles for the CL method.

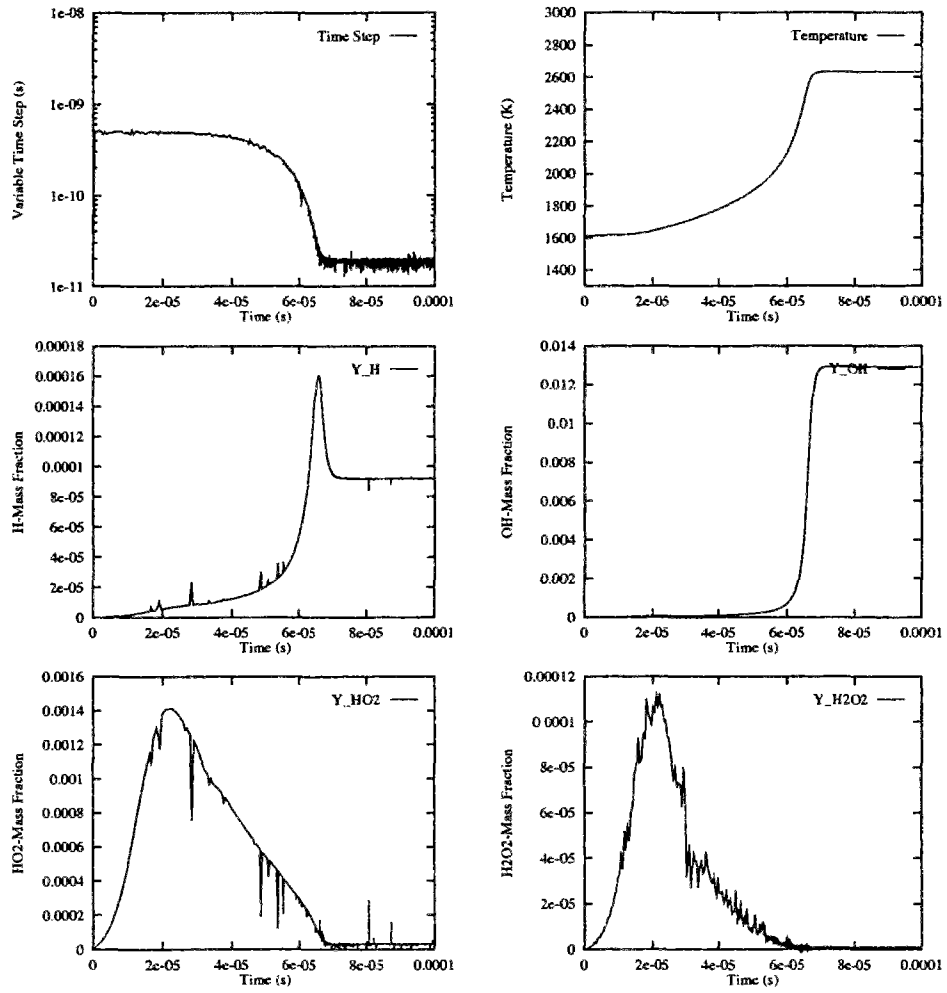


FIG. 2.15 - Variable time step, temperature and mass fractions profiles for the UN method.

quence, most of the computational time is employed to go from equilibrium to the final time. with a time step which is more than ten times smaller than the average time step used before equilibrium!

2.4 Numerical analysis of some simple models

The results of the numerical experiments presented above are surprising in several aspects, and require some explanation. This is the objective of this section, where we analyze several simpler models (the full hydrogen-air mechanism being out of reach for an analytical investigation).

Our numerical analyses will indeed explain several of the results observed above. In particular, we will examine on several examples the stability limits of the coupled and uncoupled linearized implicit methods; we will see why these methods behave much better for globally endothermic chemical mechanisms than for exothermic chemistries, and that, in the latter case, they may suffer from stability restrictions which are even more severe than the stability limit of the first-order explicit method!!

In the analyses below, we will say that a numerical method is stable (for a given time step) if it preserves the inequalities $0 \leq Y_k \leq 1$ for all species (in such a case, lower and upper bounds for the temperature follow from the energy conservation).

2.4.1 The simple reversible model

Describing the model

We begin by considering the simple reversible reaction:



For the sake of simplicity, we will assume here that both species A and B have constant and equal specific heats at constant pressure: $C_{vA} = C_{vB} = C_v$; they also have the same molecular weight $W_A = W_B = W$. Using the notations of Section 2.2.2, we will assume that $Q = H_A^0 - H_B^0 = \epsilon_A^0 - \epsilon_B^0 > 0$, which means that the forward reaction $A \longrightarrow B$ is exothermic. Lastly, let Y and Z denote the mass fractions of A and B respectively. System (2.8) now takes the form:

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = -\frac{W}{\rho} Y k_1(T) + \frac{W}{\rho} Z k_2(T) \stackrel{\text{def}}{=} -Y f_1(T) + Z f_2(T) , \\ \frac{dZ}{dt} = Y f_1(T) - Z f_2(T) , \\ \epsilon(T, Y, Z) = Y(\epsilon_A^0 + W C_v T) + Z(\epsilon_B^0 + W C_v T) = \text{Constant} , \end{cases} \quad (2.29)$$

with:

$$f_1(T) = A_1 T^\beta \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right), \quad f_2(T) = A_2 T^\beta \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right); \quad (2.30)$$

the fact that the two reaction rates f_1 and f_2 involve the same exponent β , as well as the relation:

$$E_2 = E_1 + Q, \quad (2.31)$$

follow from the relations (2.13), (2.14) and (2.15).

We recall that C_v and ρ are constant in system (2.29), and we set $U = \frac{Q}{WC_v}$. Obviously, any solution of this system satisfies the identities:

$$Y + Z = 1, \quad T + UY = \text{Constant} \stackrel{\text{def}}{=} H^0. \quad (2.32)$$

Since all numerical methods considered below also preserve these relations, we may simply rewrite the system (2.29) as:

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = -Y f_1(T) + (1 - Y) f_2(T), \\ T + UY = H^0. \end{cases} \quad (2.33)$$

This system is completed with initial conditions: $Y = Y^0, T = T^0$.

Remark 4.1: Below, we will sometimes need to consider realistic values for the constants and variables of the problem. These values are obtained from the following estimates and relations: we have $Y \in [0, 1]$, $T \in [T_{\min}, T_{\max}]$, with $T_{\max} = H^0$, $(T_{\max} - T_{\min}) = U$; typically, we have $\frac{T_{\max}}{T_{\min}} \approx 5$ to 8 and $\frac{E_1}{RT_{\max}} \approx 4$ to 10 . Also, from Mayer's relation, $(\gamma - 1)WC_v = R$, where γ is the specific heat ratio $\frac{C_p}{C_v}$. •

Now, the differential form of the temperature equation, consistent with (2.33), writes:

$$\frac{dT}{dt} = UY f_1(T) - U(1 - Y) f_2(T). \quad (2.34)$$

In view of these relations, the region:

$$\mathcal{R}_- = \{(Y, T), Y f_1(T) - (1 - Y) f_2(T) < 0\} \quad (2.35)$$

of the (Y, T) plane will be called the *endothermic domain*, whereas the region:

$$\mathcal{R}_+ = \{(Y, T), Y f_1(T) - (1 - Y) f_2(T) > 0\} \quad (2.36)$$

will be called the *exothermic domain*. Both domains are separated by the *equilibrium curve*, defined as:

$$Y = \frac{f_2(T)}{f_1(T) + f_2(T)} \stackrel{\text{def}}{=} Y^{\text{eq}}(T) \quad (2.37)$$

(notice that $Y^{\text{eq}}(T) \in (0, 1)$ for any temperature T). Using (2.30) and (2.31), it is easy to see that $Y^{\text{eq}}(T)$ is a monotone increasing function of T ; furthermore, the asymptotic solution of system (2.33) as t tends to $+\infty$, which we denote as (Y^∞, T^∞) , is uniquely determined by the system:

$$Y^\infty = Y^{\text{eq}}(T^\infty), \quad T^\infty + UY^\infty = H^0 \quad (2.38)$$

(see Figure 2.16).

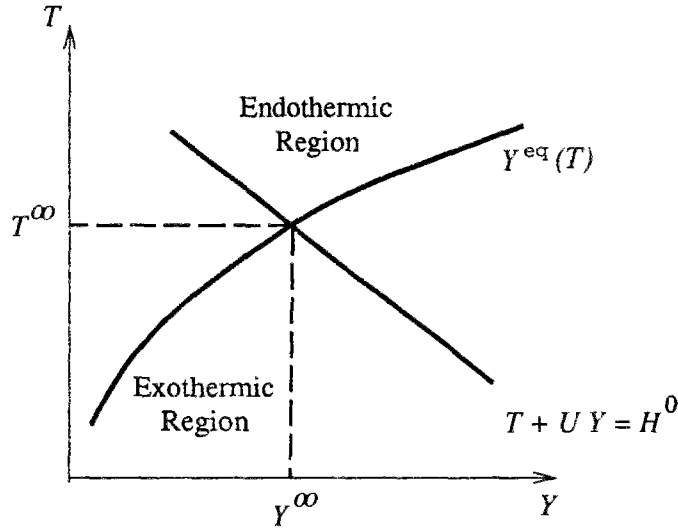


FIG. 2.16 - *The equilibrium curve.*

We are going to carry out the numerical analysis of system (2.33) with the assumption that the activation energies are high enough. More precisely, we will assume that:

$$\frac{E_2}{RT_{\max}} \geq 2, \quad (2.39)$$

and also that:

$$\beta \geq 0. \quad (2.40)$$

Numerical analysis

We can now analyse how several of the numerical methods considered in Section 2.3 behave when applied to the simple reversible model (2.28).

We begin with the following simple result for the UN and UL methods:

Proposition 4.2:

For the simple reversible reaction (2.28), the uncoupled Newton and uncoupled linearized methods are unconditionnally stable. •

PROOF: Since system (2.33) is linear with respect to the mass fraction Y , the UN and UL methods coincide in the present case. They take the form:

$$\begin{cases} \frac{Y^{n+1} - Y^n}{\Delta t} = \left(-Y^{n+1} f_1(T^n) + (1 - Y^{n+1}) f_2(T^n) \right), \\ T^{n+1} + UY^{n+1} = H^0. \end{cases} \quad (2.41)$$

Then, we get:

$$Y^{n+1} = \frac{\frac{Y^n}{\Delta t} + f_2(T^n)}{\frac{1}{\Delta t} + (f_1(T^n) + f_2(T^n))}, \quad (2.42)$$

and we easily see that Y^{n+1} lies between 0 and 1 as soon as Y^n does. •

The situation is more complex for the CL method. We will prove the following:

Proposition 4.3:

For the simple reversible reaction (2.28), the coupled linearized method is not unconditionally stable.

However, if the assumptions (2.39) and (2.40) hold, then the coupled linearized method is unconditionally stable in the endothermic domain \mathcal{R}_- . •

More precise statements will be made below about the actual stability restrictions in the cases where unconditional stability does not hold, i.e. in some parts of the exothermic domain.

The proof of Proposition 4.3 consists of three Lemmas:

Lemma 4.4:

Let (Y^n, T^n) be the discrete temperature and mass fraction computed with the coupled linearized method.

There exists a C^1 monotone increasing curve $Y = Y^(T)$, with:*

$$Y^{\text{eq}}(T) < Y^*(T) < 1, \quad (2.43)$$

such that $0 \leq Y^{n+1} \leq 1$ for any $\Delta t > 0$ as soon as $0 \leq Y^n \leq Y^(T^n)$. •*

PROOF: The CL scheme takes the form:

$$\begin{cases} \frac{Y^{n+1} - Y^n}{\Delta t} = \left(-Y^{n+1} f_1(T^n) + (1 - Y^{n+1}) f_2(T^n) \right. \\ \quad \left. - Y^n f_1'(T^n)(T^{n+1} - T^n) + (1 - Y^n) f_2'(T^n)(T^{n+1} - T^n) \right), \\ T^{n+1} + UY^{n+1} = H^0, \end{cases} \quad (2.44)$$

from which we get:

$$Y^{n+1} = \frac{\frac{Y^n}{\Delta t} + f_2(T^n) + UY^n (-Y^n f'_1(T^n) + (1 - Y^n) f'_2(T^n))}{\frac{1}{\Delta t} + (f_1(T^n) + f_2(T^n)) + U (-Y^n f'_1(T^n) + (1 - Y^n) f'_2(T^n))} . \quad (2.45)$$

Assume now that $Y^n \in [0, 1]$. If the term $-Y^n f'_1(T^n) + (1 - Y^n) f'_2(T^n)$ is non-negative, it is then clear that $0 \leq Y^{n+1} \leq 1$ for any $\Delta t > 0$. This condition writes:

$$Y^n \leq \frac{f'_2(T^n)}{f'_1(T^n) + f'_2(T^n)} \stackrel{\text{def}}{=} Y^*(T^n) . \quad (2.46)$$

From the form (2.30) of f_1 and f_2 , we get:

$$f'_i(T) = \left(\beta + \frac{E_i}{RT} \right) \frac{f_i(T)}{T} , \quad (2.47)$$

for $i = 1, 2$. From (2.31), this shows that, for any T :

$$\frac{f'_1(T)}{f'_2(T)} > \frac{f_1(T)}{f_2(T)} , \quad (2.48)$$

whence $Y^*(T) > Y^{\text{eq}}(T)$ from (2.37) and (2.46). •

Now, the endothermic domain \mathcal{R}_- is a subset of the region $\{(Y, T) , 0 \leq Y \leq Y^*(T)\}$ from (2.43), as shown on Figure 2.17.

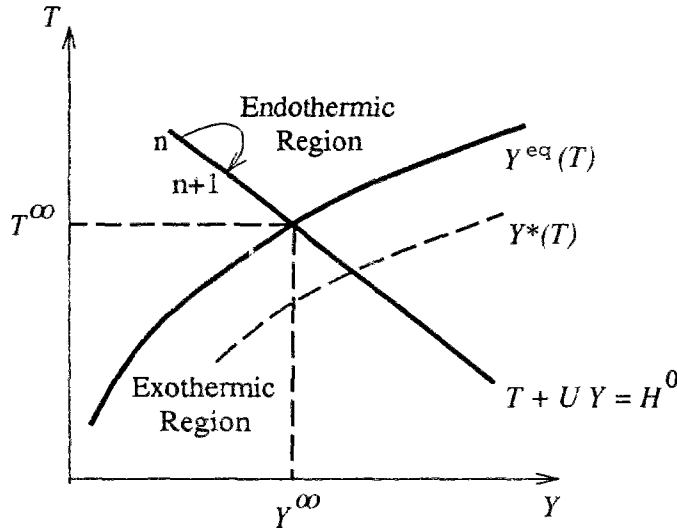


FIG. 2.17 - The equilibrium curve and the curve $Y = Y^*(T)$.

Therefore, in order to show that the CL method is unconditionally stable in the endothermic region, it remains to prove the following:

Lemma 4.5:

Let (Y^n, T^n) be the discrete temperature and mass fraction computed with the coupled linearized method.

Assume that the technical assumptions (2.39) and (2.40) hold, and that $(Y^n, T^n) \in \mathcal{R}_-$. Then, $(Y^{n+1}, T^{n+1}) \in \mathcal{R}_-$. •

PROOF: Assume that $(Y^n, T^n) \in \mathcal{R}_-$. We rewrite (2.45) as:

$$Y^{n+1} = Y^n + \frac{(-Y^n f_1(T^n) + (1 - Y^n) f_2(T^n))}{\frac{1}{\Delta t} + (f_1(T^n) + f_2(T^n)) + U(-Y^n f_1'(T^n) + (1 - Y^n) f_2'(T^n))}. \quad (2.49)$$

The right-hand side of (2.49) is a bounded monotone increasing function of the time step, which we will denote as $Y^{n+1}(\Delta t)$. Therefore, for any $\Delta t > 0$, we have:

$$Y^{n+1}(\Delta t) < \lim_{\Delta t \nearrow +\infty} Y^{n+1}(\Delta t) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{Y}^{n+1}. \quad (2.50)$$

But, introducing the function $g(Y)$ defined as:

$$g(Y) = -Y f_1(H^0 - UY) + (1 - Y) f_2(H^0 - UY), \quad (2.51)$$

it is easy to check that \hat{Y}^{n+1} satisfies:

$$g(Y^n) + \frac{dg}{dY}(Y^n)(\hat{Y}^{n+1} - Y^n) = 0. \quad (2.52)$$

Since g is non-negative and satisfies $g(Y^\infty) = 0$, the proof of Lemma 4.5 will be complete if we show that g is convex in the endothermic region, i.e. for $Y < Y^\infty$; we will then have $Y^n < \hat{Y}^{n+1} < Y^\infty$, whence $(Y^{n+1}, T^{n+1}) \in \mathcal{R}_-$ for any Δt (see Figure 2.17).

Let us therefore prove that g is convex in the endothermic region. For the sake of simplicity, we denote $T^H(Y) = H^0 - UY$. The first derivative of g is given by:

$$g'(Y) = -f_1(T^H(Y)) - f_2(T^H(Y)) - U \left[-Y f_1'(T^H(Y)) + (1 - Y) f_2'(T^H(Y)) \right]. \quad (2.53)$$

In the endothermic region, we have $Y < Y^* (T^H(Y))$ from (2.43) and the monotonicity of Y^* (see Figure 2.17), which shows that the term between brackets in (2.53) is positive. Therefore, $g'(Y) < 0$ for $Y < Y^\infty$.

A second differentiation yields, after some algebra:

$$\begin{aligned} g''(Y) = & 2U \left(f_1'(T^H(Y)) + f_2'(T^H(Y)) \right) \\ & + \left(\frac{U}{T^H(Y)} \right)^2 \left[-Y f_1(T^H(Y)) \left(\chi_1^2 - \chi_1 - \frac{E_1}{RT^H(Y)} \right) \right. \\ & \left. + (1 - Y) f_2(T^H(Y)) \left(\chi_2^2 - \chi_2 - \frac{E_2}{RT^H(Y)} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.54)$$

with $\chi_i = \beta + \frac{E_i}{RT^H(Y)}$ for $i = 1, 2$. Using (2.31), we can rewrite this as:

$$\begin{aligned} g''(Y) = & 2U \left(f_1'(T^H(Y)) + f_2'(T^H(Y)) \right) + \left(\frac{U}{T^H(Y)} \right)^2 \left(\frac{Q \chi Y f_1(T^H(Y))}{RT^H(Y)} \right) \\ & + \left(\frac{U}{T^H(Y)} \right)^2 \left[\left(\chi_2^2 - \chi_2 - \frac{E_2}{RT^H(Y)} \right) \left(-Y f_1(T^H(Y)) + (1 - Y) f_2(T^H(Y)) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.55)$$

with $\chi = \frac{Q}{RT^H(Y)} + 2 \left(\beta - 1 + \frac{E_1}{RT^H(Y)} \right)$.

In the endothermic domain, we know that $-Y f_1(T^H(Y)) + (1 - Y) f_2(T^H(Y)) > 0$. Therefore, $g''(Y)$ will be proved to be positive if we show that:

$$\chi \geq 0 \quad \text{and} \quad \chi_2^2 - \chi_2 - \frac{E_2}{RT^H(Y)} \geq 0. \quad (2.56)$$

Regarding the second expression in (2.56) as a second-order polynomial in the variable χ_2 , we can rewrite these two conditions as:

$$\frac{2E_1 + Q}{2RT^H(Y)} \geq 1 - \beta \quad \text{and} \quad \chi_2 = \beta + \frac{E_2}{RT^H(Y)} \geq \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{E_2}{RT^H(Y)} + \frac{1}{4}}. \quad (2.57)$$

After some simple algebra, using the assumption (2.40) on β , one easily checks that the last condition in (2.57) is equivalent to: $2RT^H(Y) \leq E_2$. Both conditions (2.57) are then fulfilled from (2.39), which ends the proof. •

Remark 4.6: It is easy to see from the above proof that the same conclusions can be reached even if $\beta < 0$, but with a stronger hypothesis than (2.39) on the activation energies. For instance, the above results remain true if the conditions (2.39)-(2.40) are replaced by:

$$\beta \geq -3 \quad \text{and} \quad 2RT_{max} \leq \min \left(\frac{E_1 + E_2}{4}, \frac{E_2}{3} \right). \bullet \quad (2.58)$$

Remark 4.7: In fact, the preceding proofs show that the CL method is unconditionally stable as soon as the initial condition satisfies $Y^0 \leq Y^*(T^0)$. Indeed, if the initial data lies above the curve $Y = Y^*(T)$ but in the exothermic domain, we know that $0 \leq Y^{n+1} \leq 1$ for any $\Delta t > 0$, and (2.49) shows that $Y^{n+1} < Y^n$. This means that the sequence (Y^n) is decreasing for n small enough. Then, either this sequence always decreases, which means that $(Y^n, T^n) \in \mathcal{R}_+$ and $Y^n < Y^*(T^n)$ for all n , and the scheme is unconditionally stable from Lemma 4.4; or there exists n_0 such that $(Y^{n_0}, T^{n_0}) \in \mathcal{R}_-$ and, for $n > n_0$, the sequence (Y^n) increases but (Y^n, T^n) remains in the endothermic domain from Lemma 4.5. In both cases, we have:

$$\lim_{n \nearrow +\infty} Y^n = Y^\infty, \quad \lim_{n \nearrow +\infty} T^n = T^\infty. \bullet \quad (2.59)$$

To conclude our analysis, it remains to examine why the CL method is *not* unconditionally stable in the whole exothermic domain. This is the object of the next Lemma:

Lemma 4.8:

The coupled linearized method is not always unconditionnally stable for the simple reversible reaction (2.28). •

PROOF: In Lemma 4.4, we have written only a sufficient condition for the stability of the method. Now, returning to (2.45) and assuming that $0 \leq Y^n \leq 1$, it is easy to see that the property:

$$0 \leq Y^{n+1} \leq 1 \quad \forall \Delta t > 0 \quad (2.60)$$

is achieved if the following two *necessary and sufficient* conditions are satisfied:

$$\begin{cases} f_2(T^n) + UY^n (-Y^n f_1'(T^n) + (1 - Y^n) f_2'(T^n)) \geq 0 , \\ f_1(T^n) + U(1 - Y^n) (-Y^n f_1'(T^n) + (1 - Y^n) f_2'(T^n)) \geq 0 . \end{cases} \quad (2.61)$$

Writing the first inequality as $\Lambda_1(Y) = (f_1' + f_2')Y^2 - f_2'Y - \frac{f_2}{U} \leq 0$, we see that the discriminant of Λ_1 , $\Delta(\Lambda_1) = f_2'^2 + \frac{4f_2}{U}(f_1' + f_2')$, is always positive, and that Λ_1 has exactly one positive root. The first condition in (2.61) may therefore be written under the form:

$$Y^n \leq \mathcal{Y}_1(T^n) . \quad (2.62)$$

With realistic values for E_1 , Q and T (see Remark 4.1), $\Lambda_1(1)$ is positive, which means that $0 < \mathcal{Y}_1(T) < 1$ and that (2.62) introduces an actual restriction.

The second inequality in (2.61) leads to:

$$\Lambda_2(Y) = (f_1' + f_2')Y^2 - (2f_2' + f_1')Y + \frac{f_1}{U} + f_2' \geq 0 . \quad (2.63)$$

The discriminant of Λ_2 is $\Delta(\Lambda_2) = f_1'^2 - \frac{4f_1}{U}(f_1' + f_2')$. Again, with realistic values for E_1 , Q and T , this expression is positive. Examining the values of $\Lambda_2(0)$, $\Lambda_2'(0)$, $\Lambda_2(1)$, $\Lambda_2'(1)$, it is easy to see that Λ_2 has two roots inside the interval $[0, 1]$, which means that the second condition in (2.61) is equivalent to a condition of the form:

$$Y^n \notin [\mathcal{Y}_2(T^n), \mathcal{Y}_3(T^n)] , \quad (2.64)$$

with $0 < \mathcal{Y}_2(T) < \mathcal{Y}_3(T) < 1$.

The two conditions (2.62)-(2.64) show that the CL scheme is not unconditionally stable. •

We will not try to exploit any further the conditions (2.62)-(2.64), which are quite heavy to handle with. Instead, we will now examine the simpler case of a non-reversible reaction.

2.4.2 The one-step reaction

For the sake of simplicity, let us now consider the simplest case of a single one-step reaction $A \longrightarrow B$. Keeping the same notations as above, we will simply assume that $A_2 = 0$ in (2.30). Our aim here is to compare the stability restrictions for the linearized implicit schemes and the first-order explicit scheme.

We easily have:

$$Y^{n+1} = Y^n (1 - \Delta t f_1(T^n)) \quad (2.65)$$

for the explicit forward Euler scheme,

$$Y^{n+1} = \frac{Y^n}{1 + \Delta t f_1(T^n)} \quad (2.66)$$

for the UL method, which is still unconditionally stable, and:

$$Y^{n+1} = \frac{\frac{Y^n}{\Delta t} - U(Y^n)^2 f_1'(T^n)}{\frac{1}{\Delta t} + f_1(T^n) - U Y^n f_1'(T^n)} \quad (2.67)$$

for the CL scheme. It is then easy to see that the explicit method (2.65) is stable under the condition:

$$\Delta t \leq \Delta t_{EXP} = \frac{1}{f_1(T^n)} , \quad (2.68)$$

whereas the CL method is stable under the following condition (if $Y^n > 0$):

$$\Delta t \leq \Delta t_{CL} = \frac{1}{U Y^n f_1'(T^n)} . \quad (2.69)$$

Then, the ratio of these two limiting values of the time step is:

$$\frac{\Delta t_{CL}}{\Delta t_{EXP}} = \frac{f_1(T^n)}{U Y^n f_1'(T^n)} = \frac{T^n}{T_{max} - T_{min}} \frac{1}{Y^n} \frac{1}{\beta + \frac{E_1}{RT^n}} ; \quad (2.70)$$

we have used Remark 4.1 and (2.47). It is then clear that this ratio can be substantially smaller than 1: *the stability restriction of the coupled linearized implicit method is then strictly more severe than the stability limit of the explicit Euler forward scheme!!*

2.4.3 Global hydrogen-oxygen reactions

We will now analyse further the UL method, which we found to be unconditionnally stable for the simple reversible model (2.28), for two global formulations of the hydrogen-oxygen combustion. In fact, we will consider the two following reversible models:



and:



and we will show that, surprisingly, the application of the uncoupled linearized method to (2.71) and (2.72) leads to very different stability limits.

The model with integer stoichiometric coefficients

Let us begin with the first model (2.71).

Calling X , Y and Z the mass fractions of H_2 , O_2 and H_2O respectively, and $f_1(T)$ and $f_2(T)$ the forward and reverse reaction rates, we are led to the system:

$$\begin{cases} \dot{X} = -2W_{H_2} (X^2Y f_1 - Z^2 f_2) , \\ \dot{Y} = -W_{O_2} (X^2Y f_1 - Z^2 f_2) , \\ \dot{Z} = 2W_{H_2O} (X^2Y f_1 - Z^2 f_2) . \end{cases} \quad (2.73)$$

We then have the following result:

Proposition 4.9:

For the global reversible reaction (2.71), the uncoupled linearized method is unconditionnally stable: if $X^n, Y^n, Z^n \geq 0$ and $X^n + Y^n + Z^n = 1$, then $X^{n+1}, Y^{n+1}, Z^{n+1} \geq 0$ and $X^{n+1} + Y^{n+1} + Z^{n+1} = 1$ for any Δt . •

PROOF: Writing $\delta F = F^{n+1} - F^n$ for $F = X, Y$ or Z , we may write the UL method for the mass fraction X as:

$$\frac{\delta X}{\Delta t} = -2W_{H_2} \left[(X^2Y f_1 - Z^2 f_2) + 2XY f_1 \delta X + X^2 f_1 \delta Y - 2Z f_2 \delta Z \right] . \quad (2.74)$$

We have omitted the superscripts n for X^n, Y^n and Z^n in the right-hand side of this relation. Moreover, we have $\delta Y = \frac{W_{O_2}}{2W_{H_2}} \delta X$ and $\delta Z = -\frac{W_{H_2O}}{W_{H_2}} \delta X$ from (2.73). After a straightforward calculation, we obtain:

$$\begin{cases} X^{n+1} = \frac{\frac{X}{\Delta t} + (W_{O_2} X^3 + 2W_{H_2} X^2 Y) f_1 + (4W_{H_2O} X Z + 2W_{H_2} Z^2) f_2}{\frac{1}{\Delta t} + (4W_{H_2} X Y + W_{O_2} X^2) f_1 + 4W_{H_2O} Z f_2} , \\ Y^{n+1} = \frac{\frac{Y}{\Delta t} + 4W_{H_2} X Y^2 f_1 + (4W_{H_2O} Y Z + W_{O_2} Z^2) f_2}{\frac{1}{\Delta t} + (4W_{H_2} X Y + W_{O_2} X^2) f_1 + 4W_{H_2O} Z f_2} , \\ Z^{n+1} = \frac{\frac{Z}{\Delta t} + (2W_{H_2O} X^2 Y + W_{O_2} X^2 Z + 4W_{H_2} X Y Z) f_1 + (2W_{H_2O} Z^2) f_2}{\frac{1}{\Delta t} + (4W_{H_2} X Y + W_{O_2} X^2) f_1 + 4W_{H_2O} Z f_2} . \end{cases} \quad (2.75)$$

Now, assume that $X^n, Y^n, Z^n \geq 0$ and that $X^n + Y^n + Z^n = 1$. It is then obvious that $X^{n+1}, Y^{n+1}, Z^{n+1} \geq 0$ for any $\Delta t > 0$. Moreover, using the relation $2W_{H_2} + W_{O_2} = 2W_{H_2O}$, it is easy to check that $X^{n+1} + Y^{n+1} + Z^{n+1} = 1$, which completes the proof. •

The model with non-integer stoichiometric coefficients

Considering now the second model (2.72) and using the same notations, we obtain the system:

$$\begin{cases} \dot{X} = -W_{H_2} (X\sqrt{Y}f_1 - Zf_2) , \\ \dot{Y} = -\frac{W_{O_2}}{2} (X\sqrt{Y}f_1 - Zf_2) , \\ \dot{Z} = W_{H_2O} (X\sqrt{Y}f_1 - Zf_2) . \end{cases} \quad (2.76)$$

We then have the following result, which says that the UL method is *not* unconditionnally stable for this model:

Proposition 4.10:

For the global reversible reaction (2.72), the uncoupled linearized method is not unconditionally stable. The stability condition writes:

$$\frac{1}{\Delta t} \geq \left(\frac{W_{O_2}X}{4\sqrt{Y}} - W_{H_2}\sqrt{Y} \right) f_1 - \left(\frac{W_{O_2}Z}{2Y} + W_{H_2O} \right) f_2 , \quad (2.77)$$

for $Y > 0$. •

PROOF: After some algebra, we find that the application of the UL method to (2.76) leads to:

$$\begin{cases} X^{n+1} = \frac{\frac{X}{\Delta t} + \frac{X^2 W_{O_2}}{4\sqrt{Y}} f_1 + (X W_{H_2O} + Z W_{H_2}) f_2}{\frac{1}{\Delta t} + \left(W_{H_2}\sqrt{Y} + \frac{W_{O_2}X}{4\sqrt{Y}} \right) f_1 + W_{H_2O} f_2} , \\ Y^{n+1} = \frac{\frac{Y}{\Delta t} + \left(W_{H_2}Y\sqrt{Y} - \frac{W_{O_2}X\sqrt{Y}}{4} \right) f_1 + \left(W_{H_2O}Y + \frac{Z W_{O_2}}{2} \right) f_2}{\frac{1}{\Delta t} + \left(W_{H_2}\sqrt{Y} + \frac{W_{O_2}X}{4\sqrt{Y}} \right) f_1 + W_{H_2O} f_2} , \\ Z^{n+1} = \frac{\frac{Z}{\Delta t} + \left(Z\sqrt{Y}W_{H_2} + \frac{W_{O_2}XZ}{4\sqrt{Y}} + X\sqrt{Y}W_{H_2O} \right) f_1}{\frac{1}{\Delta t} + \left(W_{H_2}\sqrt{Y} + \frac{W_{O_2}X}{4\sqrt{Y}} \right) f_1 + W_{H_2O} f_2} . \end{cases} \quad (2.78)$$

The arguments are then the same as in the preceding proof: assuming that $X^n, Y^n, Z^n \geq 0$ and that $X^n + Y^n + Z^n = 1$, it is obvious that, for any $\Delta t > 0$, we have $X^{n+1} \geq 0$, $Z^{n+1} \geq 0$ and $X^{n+1} + Y^{n+1} + Z^{n+1} = 1$. Also, it is clear that $Y^{n+1} \geq 0$ if and only if (2.77) holds, which completes the proof. •

Remark 4.11: Let us comment about the stability condition (2.77). It is clear that, if X is small enough, i.e. for sufficiently *lean* mixtures, the UL scheme is unconditionnally stable (the

right-hand side of (2.77) is then negative). On the other hand, for *rich* mixtures, i.e for Y small enough, there is an actual limitation on Δt , which takes the form (at the leading order):

$$\Delta t \leq \Delta t_{UL} = \frac{4\sqrt{Y}}{XW_{O_2}f_1} . \quad (2.79)$$

On the other hand, it is readily seen in this case that the stability limit of the explicit forward Euler scheme reads:

$$\Delta t \leq \Delta t_{EXP} = \frac{2\sqrt{Y}}{XW_{O_2}f_1} . \quad (2.80)$$

Thus, for very rich mixtures, the uncoupled linearized method may operate with time steps which are only twice greater than the time step allowed for the explicit method. •

2.4.4 A remark about the fractional-step approach

The previous sections show on the basis of the analysis of several tractable models that the linearized implicit methods suffer from very severe stability restrictions for the integration of the chemical model (2.8). One may then wonder whether this result is not due, at least partly, to our fractional-step approach. In other words, may the linearized implicit schemes operate with larger time steps if, instead of considering the sole chemical source terms, we simultaneously integrate the convective (and possibly the diffusive) terms together with the chemical terms?

The answer to this question is negative: the stability limit of the linearized implicit methods for the coupled convective-reactive system is not any greater than the stability limit of these schemes for the purely chemical system (2.8). This fact is illustrated by the following example, where we consider the most simple convective-reactive system for a one-step reaction $A \longrightarrow B$, with constant velocity and constant energy:

$$Y_t + u_0 Y_x = -Y f_1(H^0 - UY) . \quad (2.81)$$

Assuming for the sake of clarity that $u_0 > 0$ and setting again $T^H(Y) = H^0 - UY$, we have (compare with (2.69)):

Lemma 4.12:

For the solution of (2.81), the upwind linearized implicit scheme:

$$\frac{Y_j^{n+1} - Y_j^n}{\Delta t} + u_0 \frac{Y_j^{n+1} - Y_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} = -Y_j^{n+1} f_1(T^H(Y_j^n)) + UY_j^n f_1'(T^H(Y_j^n)) (Y_j^{n+1} - Y_j^n) \quad (2.82)$$

is stable under the condition:

$$\Delta t \leq \frac{1}{\max_j UY_j^n f_1'(T^H(Y_j^n))} . \bullet \quad (2.83)$$

PROOF: The scheme (2.82) can be written in matrix form as $\mathcal{A}Y^{n+1} = \mathcal{B}Y^n$, with:

$$\mathcal{A}_{j,j} = \frac{1}{\Delta t} + f_1 \left(H^0 - UY_j^n \right) - UY_j^n f_1' \left(H^0 - UY_j^n \right) + \frac{u_0}{\Delta x}, \quad \mathcal{A}_{j,j-1} = -\frac{u_0}{\Delta x}, \quad (2.84)$$

$$\mathcal{B}_{j,j} = \frac{1}{\Delta t} - UY_j^n f_1' \left(H^0 - UY_j^n \right), \quad (2.85)$$

all other terms being zero. Clearly, if (2.83) holds, then $\mathcal{B} \geq 0$, and \mathcal{A} is an M-matrix ($\mathcal{A}_{j,j} > 0$ for all j , $\mathcal{A}_{j,k} \leq 0$ for $j \neq k$ and $\sum_k \mathcal{A}_{j,k} > 0$ for all j ; see [11]). As a consequence, $\mathcal{A}^{-1} \geq 0$, whence $Y^{n+1} \geq 0$ as soon as $Y^n \geq 0$.

If (2.83) holds, we may also set $\mathcal{C} = \mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}$ and write the scheme (2.82) as $\mathcal{C}Y^{n+1} = Y^n$. Then, \mathcal{C} is an M-matrix and, denoting $\mathbf{1}$ the vector whose components are all equal to unity, we easily see that $\mathcal{C}\mathbf{1} \geq \mathbf{1}$. Thus, $\mathcal{C}^{-1} \geq 0$ and we have $\mathcal{C}^{-1}\mathbf{1} \leq \mathbf{1}$. Assuming that $Y^n \leq \mathbf{1}$, we see that $Y^{n+1} = \mathcal{C}^{-1}Y^n \leq \mathbf{1}$, which ends the proof: the inequalities $0 \leq Y_j^{n+1} \leq 1$ hold for all j . •

2.5 Conclusions

We have investigated in this paper the use of the nonlinear implicit and linearized implicit methods for the time integration of exothermic complex chemistry models.

We have enlightened the inefficiency of these methods through three numerical experiments, which showed (i) that a straightforward use of these methods leads to prohibitive computation times for the simulation of hydrogen combustion, (ii) that, for some initial conditions, several of these methods are unable to preserve the mass fractions positivity, even with extremely small time steps, and, more importantly and more surprisingly, (iii) that monitoring the time step for these calculations by only requiring the preservation of the mass fractions positivity may lead to physically unacceptable results.

We explained these observations by analysing the behaviour of the linearized implicit methods for several (not too complex) tractable chemical mechanisms. These analyses show that the stability limit of the linearized implicit methods strongly depend on the detailed form of the chemical model. Also, they explain in a convincing way that the linearized implicit methods are not suitable for the time integration of exothermic chemical mechanisms, whereas they are known to be adequate for endothermic chemistries (see [2, 3, 8]).

Remark 5.1: The nonlinear implicit methods deserve some further comments. Following the arguments used in [4], it can indeed be shown that, for any time step Δt , as soon as the nonlinear discrete system to be solved in these methods has a solution $(Y_k)^{n+1}, T^{n+1}$, then this solution satisfies the maximum principle: $0 \leq Y_k^{n+1} \leq 1$ (and this remains true if convective and diffusive terms are added; see [4]). Therefore, the instabilities observed for these methods in our experiments should be interpreted as the divergence of the Newton iterations for the

solution of the nonlinear discrete problem, not as an intrinsic instability of the nonlinear formulation itself. It might in fact be the case that this situation can be improved by using another iterative technique instead of Newton method (such as damped Newton, GMRES, ...), or by coupling the convective or diffusive terms with the chemical source terms within the iterations (see e.g. [10]). •

APPENDIX A

We give here the expression of the Jacobian matrix of the chemical terms.

Using the notations of Section 2.3.1, we wish to evaluate $G = \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial X}$. We first obtain:

$$\frac{\partial \mathcal{C}_1}{\partial T}|_{Y_k} = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k C_{v_k}(T) , \quad \frac{\partial \mathcal{C}_1}{\partial Y_k}|_{T, Y_m \ (m \neq k)} = \epsilon_k(T) .$$

For $k \geq 0$, we have:

$$\frac{\partial \mathcal{C}_{k+1}}{\partial T}|_{Y_m} = -\rho^{-1} W_k \Delta t \sum_{i=1}^I \nu_{ki} \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial T}|_{N_m} ,$$

with:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial T}|_{N_m} &= B_i \left[K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} \left(\frac{\beta_i}{T} + \frac{E_i}{R_c T^2} \right) \right. \\ &\quad \left. - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}} \left(\frac{\beta_i + \Delta \nu_i}{T} + \frac{E_i}{R_c T^2} - \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} \mathcal{G}_k(T) \right) \right] , \\ N_k &= \frac{\rho Y_k}{W_k} , \quad B_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \alpha_{ki} N_k , \\ \mathcal{G}_k(T) &= \frac{a_{6k}}{T^2} + \frac{a_{1k}}{T} + \frac{a_{2k}}{2} + \frac{a_{3k}}{3} T + \frac{a_{4k}}{4} T^2 + \frac{a_{5k}}{5} T^3 , \\ h_k(T) &= \frac{R}{W_k} \left(a_{6k} + a_{1k} T + \frac{a_{2k}}{2} T^2 + \frac{a_{3k}}{3} T^3 + \frac{a_{4k}}{4} T^4 + \frac{a_{5k}}{5} T^5 \right) , \\ C_{pk}(T) &= \frac{d}{dT} h_k(T) = \frac{R}{W_k} \left(a_{1k} + a_{2k} T + a_{3k} T^2 + a_{4k} T^3 + a_{5k} T^4 \right) , \\ C_{vk}(T) &= \frac{d}{dT} \epsilon_k(T) = C_{pk}(T) - \frac{R}{W_k} . \end{aligned}$$

Lastly, we have (δ_{km} denoting the Kronecker delta):

$$\frac{\partial \mathcal{C}_{k+1}}{\partial Y_m}|_{T, Y_l \ (l \neq m)} = \delta_{km} - \rho^{-1} \Delta t W_k \sum_{i=1}^I \nu_{ki} \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial Y_m}|_{T, Y_l \ (l \neq m)} ,$$

with:

$$\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial Y_m}|_{T, Y_l \ (l \neq m)} = \frac{\rho \alpha_{mi} \mathcal{R}_i}{W_m B_i} + B_i \left(K_{f,i} \prod_{l \neq m} N_l^{\nu'_{li}} \frac{\rho \nu'_{mi}}{W_m} N_m^{\nu'_{mi}-1} - K_{r,i} \prod_{l \neq m} N_l^{\nu''_{li}} \frac{\rho \nu''_{mi}}{W_m} N_m^{\nu''_{mi}-1} \right) .$$

In the case of chemical reactions not including a colliding third body, the above expressions are still valid with $B_i = 1$ and removing the terms involving α_{mi} in the last relation.

APPENDIX B

We now write down the two hydrogen-air combustion models, in CHEMKIN format (i.e. with C.G.S. units, activation energies E_i in cal.mol^{-1}).

The model with 9 species and 19 reactions writes:

			A_i	β_i	E_i
1	$H_2 + O_2$	$\rightleftharpoons 2OH$	1.70E13	0.	47780.
2	$H_2 + OH$	$\rightleftharpoons H_2O + H$	1.17E09	1.3	3626.
3	$H + O_2$	$\rightleftharpoons OH + O$	5.13E16	-0.816	16507.
4	$O + H_2$	$\rightleftharpoons OH + H$	1.80E10	1.	8826.
5	$H + O_2 + M$	$\rightleftharpoons HO_2 + M$	2.10E18	-1.	0.
6	$H + O_2 + O_2$	$\rightleftharpoons HO_2 + O_2$	6.70E19	-1.42	0.
7	$H + O_2 + N_2$	$\rightleftharpoons HO_2 + N_2$	6.70E19	-1.42	0.
8	$OH + HO_2$	$\rightleftharpoons H_2O + O_2$	5.00E13	0.	1000.
9	$H + HO_2$	$\rightleftharpoons 2OH$	2.50E14	0.	1900.
10	$O + HO_2$	$\rightleftharpoons O_2 + OH$	4.80E13	0.	1000.
11	$2OH$	$\rightleftharpoons O + H_2O$	6.00E08	1.3	0.
12	$H_2 + M$	$\rightleftharpoons 2H + M$	2.23E12	0.5	92600.
13	$O_2 + M$	$\rightleftharpoons 2O + M$	1.85E11	0.5	95560.
14	$H + OH + M$	$\rightleftharpoons H_2O + M$	7.50E23	-2.6	0.
15	$H + HO_2$	$\rightleftharpoons H_2 + O_2$	2.50E13	0.	700.
16	$2HO_2$	$\rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	2.00E12	0.	0.
17	$H_2O_2 + M$	$\rightleftharpoons 2OH + M$	1.30E17	0.	45500.
18	$H_2O_2 + H$	$\rightleftharpoons HO_2 + H_2$	1.60E12	0.	3800.
19	$H_2O_2 + OH$	$\rightleftharpoons H_2O + HO_2$	1.00E13	0.	1800.

For reactions 5, 12 and 14, the third-body-efficiency coefficients of α_{ki} 's are given by:

$$\alpha_{H_2O,5} = 21 \text{ , } \alpha_{H_2,5} = 3.3 \text{ ,}$$

$$\alpha_{H_2O,12} = 6 \text{ , } \alpha_{H,12} = 2 \text{ , } \alpha_{H_2,12} = 3 \text{ ,}$$

$$\alpha_{H_2O,14} = 20 \text{ .}$$

The model with 10 species and 16 reactions is the following:

			A_i	β_i	E_i
1	$H_2 + O_2$	$\rightleftharpoons 2OH$	$1.70E13$	0.	47780.
2	$H_2 + OH$	$\rightleftharpoons H_2O + H$	$5.20E13$	0.0	6500.
3	$H + O_2$	$\rightleftharpoons OH + O$	$1.22E17$	-0.907	16620.
4	$O + H_2$	$\rightleftharpoons OH + H$	$1.80E10$	1.	8826.
5	$H + O_2 + M$	$\rightleftharpoons HO_2 + M$	$2.00E15$	0.	-870.
6	$OH + HO_2$	$\rightleftharpoons H_2O + O_2$	$1.20E13$	0.	0.
7	$H + HO_2$	$\rightleftharpoons 2OH$	$6.00E13$	0.	0.
8	$O + HO_2$	$\rightleftharpoons O_2 + OH$	$1.00E13$	0.	0.
9	$2OH$	$\rightleftharpoons O + H_2O$	$1.70E06$	2.03	-1190.
10	$H_2 + M$	$\rightleftharpoons 2H + M$	$2.23E12$	0.5	92600.
11	$O_2 + M$	$\rightleftharpoons 2O + M$	$1.85E11$	0.5	95560.
12	$H + OH + M$	$\rightleftharpoons H_2O + M$	$7.50E23$	-2.6	0.
13	$H + HO_2$	$\rightleftharpoons H_2 + O_2$	$1.30E13$	0.	0.
14	$O + N_2$	$\rightleftharpoons NO + N$	$1.40E14$	0.	75800.
15	$N + O_2$	$\rightleftharpoons NO + O$	$6.40E09$	1.	6280.
16	$OH + N$	$\rightleftharpoons NO + H$	$4.00E13$	0.	0.

For reactions 5, 10 and 12, the third-body-efficiency coefficients of α_{ki} 's are given by:

$$\alpha_{H_2O,5} = 20, \quad \alpha_{H_2O,10} = 5, \quad \alpha_{H_2O,12} = 20.$$

APPENDIX C

Lastly, we give here the FORTRAN Routine for Gill's Runge-Kutta 2 method, taken from [12].

```

      SUBROUTINE GILLS(N,C,F,X,H,M,K)
C
C   THIS ROUTINE PERFORMS RK CALCULATION BY GILLS METHOD
C
C   INPUT
C       N = NUMBER OF VARIABLES
C       C = ARRAY OF N DEPENDENT VARIABLES
C       F = ARRAY OF N DERIVATIVES OF C W.R.T. X
C       X = INDEPENDENT VARIABLE
C       H = INCREMENT OF X
C       M = INDEX USED IN THE ROUTINE (INITIALIZED TO ZERO
C           BEFORE THE FIRST CALL)
C   OUTPUT
C       X,C
C       K = TEST INTEGER
C           = 1 CONTINUE
C           = 2 RETURN
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION C(10),F(10),Q(10)
      ONESIX = 1.D0/6.D0
      ONETHI = 1.D0/3.D0
      M = M +1
      GOTO(1,4,5,3,7),M
1     DO 2 I = 1,N
2     Q(I)= 0.D0
      A=0.5D0
      GOTO 9
3     A = 1.7071067811865475244D0
4     X = X + 0.5D0 * H
5     DO 6 I=1,N
      C(I) = C(I) + A * ( F(I)*H - Q(I) )
6     Q(I) = 2.D0 * A * H * F(I) + (1.D0 - 3.D0*A)*Q(I)
      A = 0.2928932188134524756D0

```

```
GOTO 9
7   DO 8 I=1,N
8   C(I) = C(I) + H*F(I)*ONESIX - Q(I) * ONETHI
    M=0
    K=2
    GOTO 10
9   K=1
10  RETURN
    END
```

Bibliographie

- [1] Y. D'ANGELO, "Analyse et Simulation numérique de phénomènes liés à la combustion supersonique", Thèse, ENPC, Paris, (1994).
- [2] J. A. DESIDERI, N. GLINSKY & E. HETTENA, "Hypersonic reactive flow computation", *Comp. Fluids*, **18**, (2), pp. 151-182, (1990).
- [3] J. A. DESIDERI, N. GLINSKY & L. FEZOU, "Numerical computation of the chemical dissociation and relaxation phenomena behind a detached strong shock", INRIA Report 774, (1987).
- [4] M. GHILANI & B. LARROUTUROU, "Upwind computation of steady planar flames with complex chemistry", *Mod. Math. Anal. Num.*, **25**, (1), pp. 67-92, (1991).
- [5] A. C. HINDMARSH, "ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers", *IMACS Trans. on Sc. Comp.*, Stepleman et al. eds., pp. 55-64, North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [6] R. J. KEE, J. A. MILLER & T. H. JEFFERSON. "CHEMKIN: a general purpose, problem-independent, transportable, FORTRAN chemical kinetics code package", SANDIA Report SAND83-8209, (1983).
- [7] B. LARROUTUROU, "How to preserve mass fractions positivity when computing compressible multi-component flows", *J. Comp. Phys.*, **95**, (1), pp. 59-84, (1991).
- [8] C. P. LI, "Implicit methods for computing chemically reacting flows", NASA Techn. Mem. 58274, Houston, (1986).
- [9] L. R. PETZOLD, "A Description of DASSL: a differential/algebraic system solver", *IMACS Trans. on Sc. Comp.*, Stepleman et al. eds., North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [10] M. D. SMOOKE, A. A. TURNBULL, R. E. MITCHELL & D. E. KEYES, "Solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames by adaptive boundary value methods", *Mathematical modelling in combustion and related topics*, Brauner & Schmidt-Lainé eds., pp. 261-300, NATO ASI Series E, Nijhoff, Doordrecht, (1988).

- [11] R. S. VARGA, "Matrix iterative analysis", Prentice Hall, (1962).
- [12] F. M. WHITE, "Viscous fluid flow", (second edition), McGraw-Hill, New-York, (1991).

Chapitre 3

Simulation numérique d'écoulements réactifs instationnaires

Ce travail fait l'objet d'un article en collaboration avec B. Larrouturou, qui sera soumis pour publication sous le titre "A Fractional-Step Method for Stiff Exothermic Complex-Chemistry Problems applied to Supersonic Combustion Simulation". Il donne également lieu aux deux communications [1] [2].

3.1 Introduction

Supersonic combustion seems to be a quite efficient way for air-breathing propulsion of hypersonic planes. But scramjet (supersonic combustion ramjet) fine analysis may demand the accurate solution of very complex governing equations, which include the coupled effects of compressible shocked flows and detailed chemical kinetics. These simulation models may also incorporate other physical effects such as heat conduction, diffusion of chemical species, radiation, turbulence or multi-phase phenomena.

One of the most difficult of the above topics is the correct and efficient numerical solution of the coupled convective-reactive systems, when the chemistry is complex, stiff and exothermic, and in the multi-dimensional case. Indeed, for hypersonic re-entry flows, the decomposition of the molecules of air (N_2 and O_2), which occurs at very high temperatures, is globally endothermic; for this kind of chemical kinetics, a linearized implicit treatment for solving the reactive terms seems to be adequate and does not affect the C.F.L. condition by more than a factor of 2, even in the case of a complex chemistry model involving 5 species and 18 reactions [10, 11, 42]. However, the extension of such a linearized implicit method to a globally exothermic kinetic model, such as the models arising in combustion, leads to a highly

unstable behaviour. Moreover, numerical instability may sometimes appear even when non-linearized implicit methods –involving a Newton resolution– are applied [41]. This situation can be improved by using another iterative technique (such as damped Newton, non-linear GMRES, ...), instead of Newton method, or by coupling the convective or diffusive terms with the chemical source terms within the iterations (see e.g. [45]).

But such a fully coupled approach - which consists in solving a non-linear system where all variables at all nodes are fully coupled - is much more expensive than the fractional-step method, which we present below, where the convective and reactive parts of the governing equations are integrated pointwise, in two successive steps.

In the sequel, after recalling the governing equations of the problem, we shall present the two steps of the method:

- (i) the fluid mechanics chemically frozen equations are solved using an extension of explicit second-order accurate approximate Riemann solvers to the multi-component case and with a realistic equation of state for the internal energy;
- (ii) the chemistry equations are then integrated using a specialized solver , starting from the values of the conservative variables obtained after (i).

We will then present and discuss some two-dimensional numerical results for stationary and unstationary calculations, with or without an adaptive grid refinement procedure.

3.2 Governing equations

3.2.1 The two-dimensional reactive Euler equations

We are interested in the numerical simulation of multi-dimensional high-speed reactive flows, such as those occurring in hypersonics, supersonic combustion or detonations. Neglecting therefore the viscous and diffusive effects, we start from the following conservative form of the κ -components two-dimensional “reactive Euler” equations:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho_k)_t + (\rho_k u)_x + (\rho_k v)_y = \Omega_k(T, Y, \rho) , \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + P)_x + (\rho uv)_y = 0 , \\ (\rho v)_t + (\rho uv)_x + (\rho v^2 + P)_y = 0 , \\ e_t + (u(e + P))_x + (v(e + P))_y = 0 , \end{array} \right. \quad (3.1)$$

with $\rho_k = \rho Y_k$, Y_k being the mass fraction of species χ_k and Y the vector of the Y_k 's; Ω_k is the chemical source term for the k -th species. The other notations are usual.

To close the system, we write two additional equations. The first one is the perfect gas

law:

$$P = \sum_{k=1}^{\kappa} \rho_k \frac{RT}{M_k}, \quad (3.2)$$

and the second one is the equation of state giving the energy:

$$e = \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + \rho h(T, Y_k) - P. \quad (3.3)$$

The specific enthalpy $h(T, \rho_k)$ for the κ -components real-gas mixture is given by a polynomial interpolation, based on JANAF tables [7].

Remark 1: We shall emphasize on this special form for the thermodynamic quantities. Usually, the equation giving the specific enthalpy in function of the temperature and the species (3.15) is not used when solving non-reactive Euler equation. Instead, one can take :

$$P = (\gamma - 1) \rho \epsilon \quad (3.4)$$

In our case, it is possible to assume a similar relation if we take :

$$\gamma \equiv \gamma_{h/\epsilon} = \frac{h(T)}{\epsilon(T)} = \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k h_k(T)}{\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T)} \quad (3.5)$$

So, $\gamma_{h/\epsilon}$ is a function of both T and the mass fractions Y_k . It is of course not a constant, nor is constant for a species alone.●

Remark 2: In the whole paper, the notation γ will design the specific heats ratio, at constant pressure and constant volume :

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k c_p^k}{\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k c_v^k}. \quad (3.6)$$

Remark 3: In the sequel, we shall call a calorically perfect gas a gas which satisfies the perfect gas law (3.2) and admits a constant γ , and therefore a constant specific heat c_v . We shall call a real gas a gas which has a specific heat depending on the temperature, **but still follows** (3.2). A perfect mixture of perfect gases should be a mixture of gases which follows Dalton's law for the partial pressures P_k : $P = \sum_{k=1}^{\kappa} P_k$ and for which the internal energy also

follows an additive law: $\epsilon = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T)$

3.2.2 Arrhenius Chemical Model

We now have to write in details the reactions terms appearing in (3.1). We consider that the composition of the mixture of κ gaseous species is influenced by I reversible chemical

reactions, which we write as:

$$\sum_{k=1}^{\kappa} \nu'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{\kappa} \nu''_{ki} \chi_k , \quad (3.7)$$

for $1 \leq i \leq I$. The source terms $\omega_k = \frac{dY_k}{dt}$ are given by:

$$\omega_k = \sum_{i=1}^I M_k \nu_{ki} \mathcal{R}_i , \quad (3.8)$$

where $\nu_{ki} = (\nu''_{ki} - \nu'_{ki})$, M_k being the molar mass of species χ_k , and where \mathcal{R}_i denotes the global advancement rate of the reaction i .

The reaction rate of the i -th reaction is then given by:

$$\mathcal{R}_i = K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}} , \quad (3.9)$$

where $N_k = \frac{\rho Y_k}{M_k}$ is the molar density of species χ_k . For third-body reactions (see Appendix), the expression for \mathcal{R}_i is modified as:

$$\mathcal{R}_i = B_i (K_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu'_{ki}} - K_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} N_k^{\nu''_{ki}}) , \quad (3.10)$$

where $B_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \alpha_{ki} N_k$; the α_{ki} 's are the third-body-efficiency coefficients of species χ_k for the reaction i .

The forward and reverse reaction rates $K_{f,i}$ and $K_{r,i}$ are given by:

$$K_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) , \quad K_{r,i} = \frac{K_{f,i}}{K_{c,i}} , \quad (3.11)$$

where E_i is the activation energy of the forward reaction, and where $K_{c,i}$ is the *equilibrium constant* for reaction i . These "constants" are given by the following expressions:

$$K_{c,i} = \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\Delta \nu_i} \exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT}\right) , \quad (3.12)$$

where:

$$\Delta \nu_i = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} , \quad \Delta S_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} S_k^0(T) , \quad \Delta H_i^0 = \sum_{k=1}^{\kappa} \nu_{ki} H_k^0(T) , \quad (3.13)$$

and where P_{atm} is the value in Pascals of the atmospheric pressure: $P_{atm} = 101325$.

In (3.13), $S_k^0(T)$ and $H_k^0(T)$ respectively denote the standard-state molar entropies and enthalpies for species k ; they are approximated using the relations:

$$\frac{S_k^0(T)}{R} = a_{1k} \ln T + a_{2k} T + \frac{a_{3k}}{2} T^2 + \frac{a_{4k}}{3} T^3 + \frac{a_{5k}}{4} T^4 + a_{7k} , \quad (3.14)$$

$$\frac{H_k^0(T)}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T + \frac{a_{3k}}{3} T^2 + \frac{a_{4k}}{4} T^3 + \frac{a_{5k}}{5} T^4 + \frac{a_{6k}}{T} , \quad (3.15)$$

where the a_{lk} coefficients are two sets of constants given for two intervals of temperatures, the “upper” and the “lower” intervals, corresponding respectively to $T \geq T_{MID}(k)$ and $T \leq T_{MID}(k)$. We use the CHEMKIN Fortran library [26] to compute all these thermodynamic data. The CHEMKIN package also allows us to easily change the chemistry kinetic model (see Appendix B).

Lastly, the specific energy $\epsilon(T, Y) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T)$ is evaluated from the relations:

$$\epsilon_k(T) = \frac{H_k^0(T) - RT}{M_k}, \quad (3.16)$$

where the molar enthalpy $H_k^0(T)$ of species χ_k is given by (3.15).

3.2.3 A Fractional-Step Approach

System (3.1) can also be put in its classical vector form:

$$W_t + F_1(W)_x + F_2(W)_y + H(W) = 0, \quad (3.17)$$

with:

$$W = \begin{pmatrix} \rho_k \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{pmatrix}, \quad F_1(W) = \begin{pmatrix} \rho_k u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(e + P) \end{pmatrix}, \quad F_2(W) = \begin{pmatrix} \rho_k v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(e + P) \end{pmatrix}, \quad H(W) = \begin{pmatrix} -\Omega_k \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

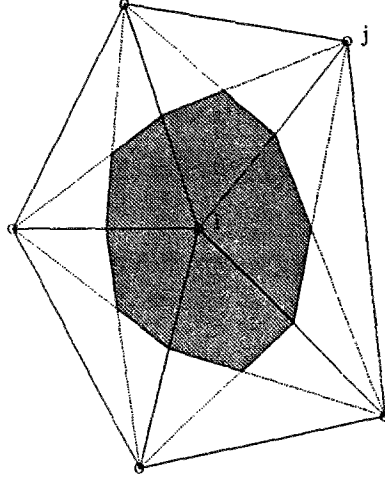
We consider the solution of system (3.17) using semi-implicit upwind finite-volume methods. The finite volumes are computational cells, constructed from a triangular finite-element mesh. Each cell C_i is constructed around a vertex i by successively linking the centers of gravity of the triangles containing i , and the middles of the segments ij , where j is a neighbour point of i (cf. figure 3.1).

Semi-implicit means here that the convective part of the system is solved using a cheap explicit solver, whereas the reactive terms are integrated point-wise, using a specialized O.D.E. or D.A.E. solver (see section 3.6.1).

The numerical scheme can be derived by using a classical variational formulation of (3.17) on C_i , and using a Green integral formula:

$$\begin{aligned} \iint_{C_i} (W_t + F_1(W)_x + F_2(W)_y + H(W)) dx dy &= \iint_{C_i} W_t dx dy + \int_{\partial C_i} (F_1 \nu_i^x + F_2 \nu_i^y) d\sigma \\ &\quad + \iint_{C_i} H(W) dx dy \end{aligned} \quad (3.19)$$

∂C_i designating the border of cell C_i , ν_i^x and ν_i^y are the components of the normal to the cell C_i .

FIG. 3.1 - Computational Integration Cell C_i

After discrete space approximation, and time integration, the global scheme can finally be written as :

$$Area(C_i) \frac{W_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} + \sum_{j \in \Lambda_i} \phi_{ij}(W_i^n, W_j^n, \vec{\eta}_{ij}) + \frac{Area(C_i)}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = 0 . \quad (3.20)$$

Here, the superscripts n and $n+1$ refer to the number of time steps, Δt is the local time step, $Area(C_i)$ is the value of the area of the cell C_i , Λ_i is the set of neighbour nodes of vertex i . Lastly, ϕ_{ij} is the numerical flux between cells C_i and C_j ; it depends on the two states W_i^n and W_j^n and on the integrated normal on the cell interface $\vec{\eta}_{ij} = \int_{C_i \cap C_j} \vec{\nu}_i d\sigma$. We evaluate these numerical fluxes for the real-gas mixture using an explicit second-order accurate multi-component Riemann solver, which has the property of preserving the maximum principle for the mass fractions. This will be presented on section 3.4.

A priori, some different possible ways of evaluating the integral $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt$ may be considered. For instance, if we simply set $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = \Delta t H(W_i^n)$, we obtain a fully explicit scheme. But the timestep limitation for such an explicit scheme is usually very drastic in the presence of complex chemistry. On the other hand, writing $\int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = \Delta t H(W_i^{n+1})$ leads to a nonlinear system in which all variables (at all nodes) are fully coupled. In order to avoid the cost of such an approach, we will consider instead a fractional step method, where the fluid-mechanics and the reactive part of the system are solved separately. We write the

two steps as:

$$\begin{cases} \text{Area}(C_i) \frac{\bar{W}_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} - \sum_{j \in \Lambda_i} \phi_{ij}(W_i^n, W_j^n, \tilde{\eta}_{ij}) = 0, \\ W_i^{n+1} - \bar{W}_i^{n+1} + \int_{t^n}^{t^{n+1}} H(W_i(t)) dt = 0, \end{cases} \quad (3.21)$$

This fractional step approach does not match the physical coupling between chemistry and fluid mechanics into the same time step, but seems to be a quite cheap method to compute stationary and unstationary chemically reacting flows.

In the sequel, we shall give a quite complete description of the methods we used to face the first convective step. We refer to [41] for an analysis of some schemes for the integration of the chemical source term.

3.3 Linear Algebra

In this section, we first verify the homogeneity of the fluxes and of some other quantities like the pressure. We then state the Riemann problem for our multi-component real gases mixture. The hyperbolicity of system (3.1) is proved by directly deriving the expressions for the Jacobian matrix Q , its eigenvalues and its right eigenvectors. The linear or genuinely non-linear nature of each field associated to each eigenvalue is after determined. We also derive the Riemann invariants and finally look for the components of W in the eigenvectors basis.

Nota Bene : The partial derivative of a quantity A with respect to another quantity B , with the quantities C and D held constant will be denoted $\left. \frac{\partial A}{\partial B} \right]_{C,D}$ or $A_{,B}]_{C,D}$ or even $A_{,B}$ or A_B if it is unequivocal.

3.3.1 Homogeneity

From eq. (3.18), and if $\rho = \sum_{k=1}^{\kappa} W_k$, the expression of the flux vector $F_1(W)$ is given by:

$$F_1(W) = \begin{pmatrix} F_{1,k} = \frac{W_k}{\rho} W_{\kappa+1} \\ F_{1,\kappa+1} = \frac{W_{\kappa+1}^2}{\rho} + P \\ F_{1,\kappa+2} = \frac{W_{\kappa+1} W_{\kappa+2}}{\rho} \\ F_{1,\kappa+3} = \frac{W_{\kappa+1}}{\rho} (W_{\kappa+3} + P) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

We can obtain a similar expression for $F_2(W)$. From (3.22), the 1-homogeneity of the fluxes

only depends on the 1-homogeneity property for the pressure. We can then enounce the following proposition, about the homogeneity of the fluxes :

Proposition 3.3.1.1:

If the specific energies $\epsilon_k(T)$ are all monotone-increasing (or decreasing) functions, the temperature is homogeneous of degree 0. From the perfect gas law (3.2), we deduce that the pressure is homogeneous of degree 1, and so are the flux vectors F_1 and F_2 . •

Proof: The pressure is given by $P = \sum_{k=1}^{\kappa} \frac{W_k}{M_k} RT$. Hence, if T is 0-homogeneous, the property of 1-homogeneity for the fluxes holds. From the equation of state (3.3), we can write :

$$\sum_{k=1}^{\kappa} W_k \epsilon_k(T(W)) = W_{\kappa+3} - \frac{1}{2} \frac{W_{\kappa+1}^2 + W_{\kappa+2}^2}{\rho} \quad (3.23)$$

If we evaluate each term of this last equality at the state rW , $r > 0$, and then divide each side by r , we get :

$$\sum_{k=1}^{\kappa} W_k \epsilon_k(T(rW)) = W_{\kappa+3} - \frac{1}{2} \frac{W_{\kappa+1}^2 + W_{\kappa+2}^2}{\rho} \quad (3.24)$$

If, for all k , the functions ϵ_k are all strictly monotone increasing (or decreasing), eq. (3.23) admits at most one zero. Physically, ϵ_k represents the specific internal energy of a species alone (the k -th), which is a strictly monotone-increasing function of the temperature in our case. So, if the right hand side of eq. (3.23) is such that the equation actually admits zeros, this root is then unique. We deduce $T(rW) = T(W)$. •

Remark 4 : From the definition of γ and the above proposition, we can notice that $\gamma(W)$ is homogeneous of degree 0. •

3.3.2 The Riemann Problem

The non-strictly hyperbolic nature of the system of conservation laws (3.1) will be verified in the next section. So, it makes sense to examine its associated Riemann problem. Introducing two separate states W_L and W_R , we are seeking the solution of the following problem in one-space dimension :

$$\begin{cases} W_t + F(W)_x = 0 \text{ for } x \in \mathbb{R} \text{ and } t \geq 0 , \\ W(x, 0) = \begin{cases} W_L & \text{if } x < 0 , \\ W_R & \text{if } x > 0 . \end{cases} \end{cases} \quad (3.25)$$

When trying to solve this problem, a first important problem concerns the genuine nonlinearity or the linear degeneracy of the characteristic fields. For our case, we shall see in the sequel that, as in the multi-component calorically perfect gas mixture, we obtain one multiple linearly degenerated eigenvalue , and two other in general genuinely nonlinear fields. In general means that it exists an assumption on $c_{n,T}$ for this essential property to hold (see also [18, 17] for

other kind of assumptions on the state law). For our case, the result is the following :

Proposition 3.3.2:

Under the condition :

$$\frac{T c_{v,T}}{c_v} < \frac{(\gamma + 1)\gamma}{(\gamma - 1)^2}, \quad (3.26)$$

the two single fields associated to the Riemann problem (3.25) are genuinely non linear.

Proof: The inequality (3.26) is established section 3.9.3, in the appendix 3.9.

In our case, since γ varies between 1.2 and 1.4, the right-hand side of the above inequality is greater than 20. The left-hand side does not exceed some unities. So, condition (3.26) is fulfilled in practice. •

As a consequence, the structure of the solution of this one-dimensional Riemann problem for multi-component real-gas flows is the same as for a single calorically perfect fluid (see [18, 19, 20]). This structure is illustrated on figure 3.2. The 1-wave and the 3-wave may be either shock waves or rarefaction waves for general initial data. The 2-wave must be a contact discontinuity across which there is no pressure or velocity jump. Of course, the exact wave structure cannot be uniquely determined by the jump conditions alone and an entropy condition must be added.

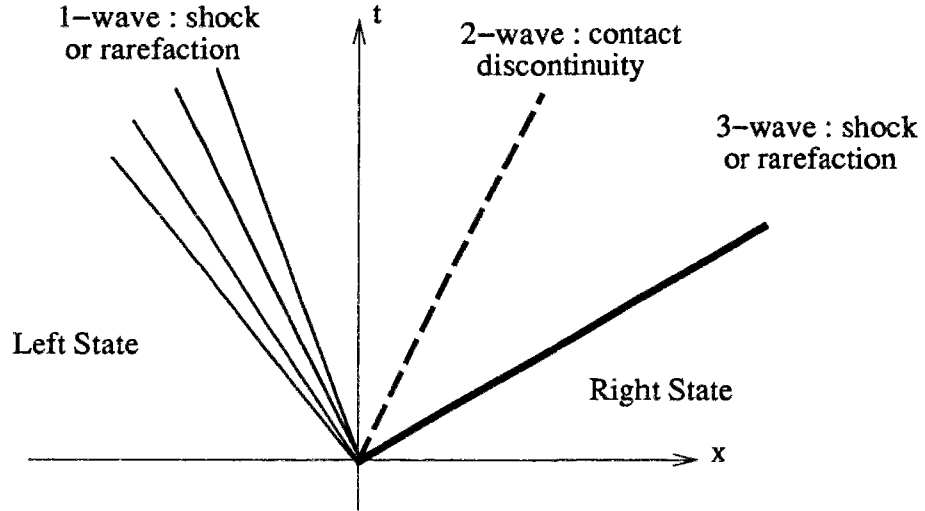


FIG. 3.2 - Structure of the Riemann Problem solution

3.3.3 Derivation of the Jacobian Matrix Q

Let us denote $A(W) = \frac{\partial F_1}{\partial W}$ and $B(W) = \frac{\partial F_2}{\partial W}$. The coefficients of these two matrices are hence $A_{i,m} = \frac{\partial F_{1i}}{\partial W_m}$ and $B_{i,m} = \frac{\partial F_{2i}}{\partial W_m}$.

After some algebra, denoting $\mathcal{H} = \frac{e + P}{\rho}$, it then comes for $A(W)$:

$$\begin{pmatrix}
 (1 - Y_1)u & \cdots & -uY_1 & \cdots & -uY_1 & Y_1 & 0 & 0 \\
 \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -uY_k & \cdots & (1 - Y_k)u & \cdots & -uY_k & Y_k & 0 & 0 \\
 \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -uY_\kappa & \cdots & -uY_\kappa & \cdots & (1 - Y_\kappa)u & Y_\kappa & 0 & 0 \\
 -u^2 + P_{\rho_1} & \cdots & -u^2 + P_{\rho_k} & \cdots & -u^2 + P_{\rho_\kappa} & 2u + P_{\rho u} & P_{\rho v} & P_e \\
 -uv & \cdots & -uv & \cdots & -uv & v & u & 0 \\
 u(-\mathcal{H} + P_{\rho_1}) & \cdots & u(-\mathcal{H} + P_{\rho_k}) & \cdots & u(-\mathcal{H} + P_{\rho_\kappa}) & \mathcal{H} + uP_{\rho u} & uP_{\rho v} & u(1 + P_e)
 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

and for $B(W)$:

$$\begin{pmatrix}
 (1 - Y_1)v & \cdots & -vY_1 & \cdots & -vY_1 & Y_1 & 0 & 0 \\
 \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -vY_k & \cdots & (1 - Y_k)v & \cdots & -vY_k & Y_k & 0 & 0 \\
 \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -vY_\kappa & \cdots & -vY_\kappa & \cdots & (1 - Y_\kappa)v & Y_\kappa & 0 & 0 \\
 -uv & \cdots & -uv & \cdots & -uv & v & u & 0 \\
 -v^2 + P_{\rho_1} & \cdots & -v^2 + P_{\rho_k} & \cdots & -v^2 + P_{\rho_\kappa} & P_{\rho u} & 2v + P_{\rho v} & P_e \\
 v(-\mathcal{H} + P_{\rho_1}) & \cdots & v(-\mathcal{H} + P_{\rho_k}) & \cdots & v(-\mathcal{H} + P_{\rho_\kappa}) & vP_{\rho u} & \mathcal{H} + vP_{\rho v} & v(1 + P_e)
 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Finally, from these two expressions of A and B , it comes for $Q = \eta_x A + \eta_y B$, if $r =$

$$\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}:$$

$$Q = \begin{pmatrix} -wrY_1 & \eta_x Y_1 & \eta_y Y_1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (1 - Y_k)wr & \eta_x Y_k & \eta_y Y_k & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -wrY_\kappa & \eta_x Y_\kappa & \eta_y Y_\kappa & 0 \\ \eta_x(-u^2 + P_{\rho_k}) - \eta_y uv & 2u\eta_x + v\eta_y + \eta_x P_{\rho u} & \eta_x P_{\rho v} + \eta_y u & \eta_x P_e \\ \eta_y(-v^2 + P_{\rho_k}) - \eta_x uv & \eta_y P_{\rho u} + \eta_x v & 2v\eta_y + u\eta_x + \eta_y P_{\rho v} & \eta_y P_e \\ wr(-\mathcal{H} + P_{\rho_k}) & \eta_x \mathcal{H} + wr P_{\rho u} & \eta_y \mathcal{H} + wr P_{\rho v} & wr(1 + P_e) \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

The speed w is defined by (3.32) and the partial derivatives involved in the above coefficients of the matrix Q are derived in the Appendix. We only present below the obtained expressions for these derivatives:

- $P_{\rho_k} = (\gamma - 1) \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h_k(T) + \frac{\gamma RT}{M_k(\gamma - 1)} \right)$
- $P_{\rho u} = -(\gamma - 1)u$
- $P_{\rho v} = -(\gamma - 1)v$
- $P_e = \gamma - 1$

3.3.4 Derivation of the eigenvalues and right eigenvectors

The verification for the proposed expressions is given in Appendix. The found eigenvalues for the matrix $Q = \eta_x A + \eta_y B$ are:

$$\begin{cases} \lambda_1 &= \dots = \lambda_k = \dots = \lambda_\kappa &= \eta_x u + \eta_y v \\ \lambda_{\kappa+1} &= \lambda_1 - a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2} &= \lambda_1 - ra \\ \lambda_{\kappa+2} &= \lambda_1 + a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2} &= \lambda_1 + ra \\ \lambda_{\kappa+3} &&= \lambda_1 \end{cases} \quad (3.30)$$

with $a^2 = \frac{\gamma RT}{M}$ where $M = \left(\sum_{k=1}^{\kappa} \frac{Y_k}{M_k} \right)^{-1}$ is the mean molar mass of the gaseous mixture.

The transformation matrix Γ is of the following kind :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} & & & & Y_1 & Y_1 & 0 \\ & & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & \text{Id}_\kappa & & & Y_k & Y_k & 0 \\ & & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & Y_\kappa & Y_\kappa & 0 \\ u & \cdots & u & \cdots & u & u - a\mu_1 & u + a\mu_1 & -\mu_2 \\ v & \cdots & v & \cdots & v & v - a\mu_2 & v + a\mu_2 & \mu_1 \\ A_1 & \cdots & A_k & \cdots & A_\kappa & \mathcal{H} - aw & \mathcal{H} + aw & -\mu_2 u + \mu_1 v \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

where Id_κ is the Identity Matrix of order κ and

$$\mu_1 = \frac{\eta_x}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} \quad , \quad \mu_2 = \frac{\eta_y}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} \quad , \quad w = \mu_1 u + \mu_2 v \quad (3.32)$$

and :

$$A_k = - \frac{P_{\rho k} + u P_{\rho u} + v P_{\rho v}}{P_e} \quad (3.33)$$

If we substitute the partial derivatives by their values into this last expression, it comes :

$$A_k = \frac{1}{2}(u^2 + v^2) + h_k(T) - \frac{\gamma RT}{M_k(\gamma - 1)} \quad (3.34)$$

3.3.5 Riemann Invariants

A scalar function $\phi^m(W)$ is called a m -Riemann invariant "in the Lax sense" (see Nota below) if it verifies :

$$\nabla_W \phi^m(W) \cdot R_m(W) = \sum_{l=1}^{\kappa} \frac{\partial \phi^m(W)}{\partial W_l} \cdot R_m^l(W) = 0 \quad (3.35)$$

As a consequence, a m -Riemann invariant is constant along a curve $W(s)$ in the state space which is parallel to the m -th right eigenvector of the Jacobian matrix Q , i.e. along which $\frac{dW}{ds}$ is always colinear with $R_m(W(s))$.

Nota : In the case of a multi-dimensional eigenvector space (i.e. in our hyperbolic case, if it exists a multiple eigenvalue) and if we consider a vector field of the kind $\nabla_W \phi(W)$ which is normal to only one right eigenvector R_m of this multi-dimensional eigenvector space, $\phi(W)$ will be called weak Riemann invariant associated with the R_m vector. If $\phi(W)$ is such that $\nabla_W \phi(W)$ is normal to the whole multi-dimensional eigenvector space associated with a multiple eigenvalue, we will speak of a strong Riemann invariant, or of a m -Riemann invariant in

the Lax sense. Here, we are only considering strong Riemann invariants (cf. section 3.4.5).

Using the expression of the right eigenvectors, given by the columns of the Γ matrix (3.31), it is straightforward to check that the following quantities are Riemann invariants:

λ_m	λ_1	$\lambda_1 - ar$	$\lambda_1 + ar$
ϕ_m	λ_1, P	Y_k	Y_k

Remark 5: λ_1 is obviously a Riemann invariant for itself since the associated field is linearly degenerated.

Remark 6: since λ_1 is a multiple eigenvalue of order $\kappa + 1$, there are only two Riemann invariants for λ_1 and the second one is the pressure.

Remark 7: all the mass fractions are constant along a curve parallel to $R_{\kappa+1}$ or $R_{\kappa+2}$. But γ , function of the mass fractions and the temperature, is not constant along this curve, since T is not. (We got, for $i = 1, 2$: $\sum_{k=1}^{\kappa+3} R_{\kappa+i}^k \cdot \frac{\partial T}{\partial W_k} = (\gamma - 1)T \neq 0$). As a consequence, the two well-known other Riemann invariants for the single-component case (i.e. $\frac{P}{\rho^\gamma}$ and $\lambda_1 + (-1)^{i+1} \frac{2\tilde{a}}{\gamma - 1}$ for $R_{\kappa+i}$, $i = 1, 2$) are not Riemann invariants in our case.

In order to see if there exist other invariants for the two genuinely non-linear fields, we can also look for the solutions of the following O.D.E.:

$$\frac{d\rho_k}{ds} = \alpha Y_k \quad \text{for } k = 1, \dots, \kappa \quad (3.36)$$

$$\frac{d\rho u}{ds} = \alpha(u + \varepsilon_i a \mu_1) \quad (3.37)$$

$$\frac{d\rho v}{ds} = \alpha(v + \varepsilon_i a \mu_2) \quad (3.38)$$

$$\frac{de}{ds} = \alpha \left(\frac{e + P}{\rho} + \varepsilon_i a w \right) \quad (3.39)$$

where $\varepsilon_i = (-1)^i$ for $i = 1$ (eigenvalue $\lambda_{\kappa+1}$) or for $i = 2$ (eigenvalue $\lambda_{\kappa+2}$). Summing all equations (3.36) leads to $\alpha = \frac{d\rho}{ds}$. (We can then find again that the mass fractions are invariants.) Summing $-\mu_2$ (3.37) and μ_1 (3.38) leads to find $-\mu_2 u + \mu_1 v$ as another invariant. •

From the definition of e (see 3.3), and eq. (3.37), (3.38), we obtain from (3.39) that:

$$\frac{P}{\rho} d\rho = \rho d\varepsilon = \rho c_v dT = \frac{\rho R}{M(\gamma - 1)} dT \quad (3.40)$$

From the perfect gas law, we remark that $\frac{dP}{P} = \frac{d\rho}{\rho} + \frac{dT}{T}$ and finally get from (3.40):

$$\frac{R}{M} \frac{d\rho}{\rho} = c_v(T) \frac{dT}{T} \quad (3.41)$$

with $c_v(T) = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k c_v^k(T)$, and $c_v^k(T) = \frac{d\varepsilon_k(T)}{dT}$ (see (3.16)). We deduce that the quantity

$s_{PG} = \frac{R}{M} \ln \rho + \int_{T_0}^T \frac{c_v(\tau, Y)}{\tau} d\tau$, $T_0 > 0$, is a Riemann invariant for both genuinely non-linear fields. •

This last quantity in fact corresponds to the quantity $\frac{P}{\rho^\gamma}$ when γ does not depend on the temperature (see remark 3).

Remark 8: Indeed, it is a well known fact that for the system of Euler equations, and in the case of a perfect mixture of perfect gases, the entropy of the mixture is a Riemann Invariant for the genuinely non-linear fields.

The equivalent to the last " γ not depending on T " invariant ($\lambda_1 - \varepsilon_i \frac{2\tilde{a}}{\gamma-1}$) can be derived by summing μ_1 (3.37) and μ_2 (3.38). We obtain that the quantity $w_i^* = \mu_1 u + \mu_2 v - \varepsilon_i \sqrt{\frac{R}{M}} \int_{T_0}^T \frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma-1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}}$ is also a Riemann invariant for each genuinely non-linear fields (i corresponding to $\lambda_{\kappa+i}$). •

Since $\lambda_{\kappa+i}$, $i = 1, 2$, are simple eigenvalues, and that we found $\kappa - 1 + 3$ independant Riemann invariants for each of these fields, we can hence be ensured that there is no more independent Riemann invariant for the genuinely non-linear fields. •

Finally, **all** the Riemann invariants (R.I.) can be summarized in the following tabular:

λ_m	λ_1	$\lambda_1 - ar$	$\lambda_1 + ar$
	$\lambda_1 = \mu_1 u + \mu_2 v$	$\mu_1 u + \mu_2 v + \sqrt{\frac{R}{M}} \int_{T_0}^T \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y)}}{\gamma(\tau, Y) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}}$	$\mu_1 u + \mu_2 v - \sqrt{\frac{R}{M}} \int_{T_0}^T \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y)}}{\gamma(\tau, Y) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}}$
R.I.	P	$\frac{R}{M} \ln \rho + \int_{T_0}^T \frac{c_v(\tau, Y)}{\tau} d\tau$	$\frac{R}{M} \ln \rho + \int_{T_0}^T \frac{c_v(\tau, Y)}{\tau} d\tau$
		$-\mu_2 u + \mu_1 v$	$-\mu_2 u + \mu_1 v$
		Y_k	Y_k

3.4 Extensions of Roe and Osher Riemann Solvers

3.4.1 Roe Solver

Roe proposed a conservative upwind scheme which uses an approximate Riemann solver based on a linearization of the fluxes [35]. A Roe-type numerical flux function can be written as :

$$\phi_{ij} = \frac{1}{2} (F(W_i) + F(W_j)) - \frac{1}{2} |\tilde{Q}| (W_j - W_i) \quad (3.42)$$

The matrix \tilde{Q} is a diagonalisable matrix which is to have the following property :

$$F(W_j) - F(W_i) = \tilde{Q} (W_j - W_i) \quad (3.43)$$

where $F = \eta_{ij,x} F_1 + \eta_{ij,y} F_2 = \eta_x F_1 + \eta_y F_2$. We have used the following classical notation: if $|\tilde{Q}| = \Gamma^{-1} |\Lambda| \Gamma$, Γ is hence the matrix of the eigenvectors of \tilde{Q} and Λ is the diagonal matrix of the eigenvalues λ_i of \tilde{Q} , $|\Lambda|$ is the diagonal matrix of the $|\lambda_i|$.

In the single component case, and with the equation of state (3.4), there are in fact several different ways of choosing the \tilde{Q} matrix satisfying (3.43). Roe proposed in [35] to define \tilde{Q} as follows: \tilde{Q} is equal to the flux Jacobian matrix for some state $\tilde{W} = \tilde{W}(W_L, W_R)$ known as "Roe's average of W_L and W_R ". The "average" function for a quantity q will be taken as:

$$\tilde{q}(q_1, q_2) = \frac{q_1 \sqrt{\rho_1} + q_2 \sqrt{\rho_2}}{\sqrt{\rho_1} + \sqrt{\rho_2}} \quad (3.44)$$

Roe only needed the average values for the speed \tilde{u} and the total specific enthalpy \mathcal{H} to compute its matrix \tilde{Q} .

3.4.2 Roe-type average

For complex equations of state, to find an average state \tilde{W} such that $\tilde{Q}(W_L, W_R) = Q(\tilde{W}(W_L, W_R))$ is still open and seems in fact probably impossible [40] [16]. But, as mentioned in [27], we can seek an extension of the Roe's average for the multi-component case, involving a quite general form for the equation of state. Indeed, since the expression of the Jacobian matrix Q shows (cf. (3.29)) that its W dependency is expressed through the quantities Y_k , u , v , h_k , $\frac{RT}{M_k}$, \mathcal{H} and γ , we seek a matrix \tilde{Q} such as:

$$\tilde{Q} = Q(\tilde{Y}_k, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{h}_k, \frac{R\tilde{T}}{M_k}, \tilde{\mathcal{H}}) \quad (3.45)$$

So, the determination of our matrix \tilde{Q} only requires a "Roe-type" average for all these quantities.

For Y_k , u , v , h_k , $\frac{RT}{M_k}$ and \mathcal{H} , the average function will be the same as Roe's:

$$\tilde{q}(q_1, q_2) = \frac{q_1 \sqrt{\rho_1} + q_2 \sqrt{\rho_2}}{\sqrt{\rho_1} + \sqrt{\rho_2}} \quad (3.46)$$

For $\tilde{\gamma}$, two cases are to be distinguished [27]:

$$\begin{aligned} \bullet \quad \tilde{\gamma} &= \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} \tilde{Y}_k (h_k^2 - h_k^1)}{\sum_{k=1}^{\kappa} \tilde{Y}_k \left((h_k^2 - \frac{RT^2}{M_k}) - (h_k^1 - \frac{RT^1}{M_k}) \right)} \quad \text{if } T^2 \neq T^1, \\ \bullet \quad \tilde{\gamma} &= \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} \tilde{Y}_k c_{p_k}(T)}{\sum_{k=1}^{\kappa} \tilde{Y}_k (c_{p_k}(T) - \frac{R}{M_k})} \quad \text{if } T^2 = T^1. \end{aligned}$$

The eigenvalues of this average matrix \tilde{Q} are formally the same as Q 's, but must be expressed in function of the averaged quantities. A straightforward substitution in (3.30) yields :

$$\begin{cases} \tilde{\lambda}_1 &= \dots = \tilde{\lambda}_k = \dots = \tilde{\lambda}_\kappa &= \eta_x \tilde{u} + \eta_y \tilde{v} \\ \tilde{\lambda}_{\kappa+1} &= \tilde{\lambda}_1 - \tilde{a} \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2} &= \tilde{\lambda}_1 - r \tilde{a} \\ \tilde{\lambda}_{\kappa+2} &= \tilde{\lambda}_1 + \tilde{a} \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2} &= \tilde{\lambda}_1 + r \tilde{a} \\ \tilde{\lambda}_{\kappa+3} &&= \tilde{\lambda}_1 \end{cases} \quad (3.47)$$

But this time \tilde{a}^2 will be equal to :

$$\tilde{a}^2 = (\tilde{\gamma} - 1) \left(\tilde{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2) \right) \quad (3.48)$$

quantity which is actually positive. Condition 3.43 can then easily be verified (see also [27]).

3.4.3 Entropic correction

Let $R_m(W_i, W_j)$ and $\lambda_m(W_i, W_j)$ denote the eigenvectors and associated eigenvalues of the \tilde{Q} matrix . Our Roe-type numerical flux can then be written as :

$$\begin{aligned} \phi^{Roe}(W_i, W_j) &= F(W_i) + \sum_{m=1}^{\kappa+3} \lambda_m^-(W_i, W_j) \psi_m R_m(W_i, W_j) \\ &= F(W_j) + \sum_{m=1}^{\kappa+3} \lambda_m^+(W_i, W_j) \psi_m R_m(W_i, W_j) \end{aligned} \quad (3.49)$$

where $\lambda_m^\pm = \pm \max(0, \pm \lambda_m)$ and

$$W_j - W_i = \sum_{m=1}^{\kappa+3} \psi_m R_m(W_i, W_j) . \quad (3.50)$$

The expression of W in the \tilde{Q} -eigenvectors basis is derived in the appendix (see section (3.9.4).

For a general hyperbolic system, the existence of a mathematical entropy (see [38]) suffices to ensure the existence of a Roe-type linearization [31]. But, this linearization is not unique and Roe-type schemes do not satisfy the entropy inequality. It is then a well-known fact that unphysical weak-speed "rarefaction shocks" may be captured [35, 37]. To face this major drawback of Roe's scheme, some authors [37, 36] have proposed a parametric approach which consists in modifying the numerical viscosity associated with the scheme (see below) near the "sonic points". Others [39] also proposed a non-parametric approach which involves a non-linear modification of the flux function at sonic points. Due to its easy implementation, we first tried parametric Harten's entropic correction.

Rewriting (3.49) in a centered manner, in order to make appear the numerical viscosity, yields :

$$\phi^{Roe}(W_i, W_j) = \frac{1}{2} \left(F(W_i) + F(W_j) - \sum_{m=1}^{\kappa+3} \nu(\lambda_m(W_i, W_j)) \psi_m R_m(W_i, W_j) \right) \quad (3.51)$$

where $\mathcal{V}(\lambda) = |\lambda|$ denotes the numerical viscosity. The Harten's correction we used consisted in replacing $\mathcal{V}(\lambda)$, for $|\lambda| \leq \delta$ by :

$$\mathcal{V}^{Harten}(\lambda) = \frac{1}{2} \left[\frac{\lambda^2 + \delta^2}{\delta} \right] \quad (3.52)$$

and $\delta = \varepsilon(|\lambda_1| + \tilde{a})$ in our case. The strictly positive real ε is a parameter which measures the amount of added artificial viscosity. A priori, the choice of ε is a crucial point for obtaining the correct solution. In our numerical experiments, we choose $\varepsilon = 0.01$ and this first approach seemed to be sufficient.

3.4.4 Multi-component Osher solver

The extension of the Osher scheme for multi-component flows has been done in [29] and in [30] for non-equilibrium flows. The extended scheme is defined as in the single component case :

$$\phi_{ij} = \frac{1}{2} (F(W_i) + F(W_j)) - \frac{1}{2} \int_{W_i}^{W_j} |Q(W)| dW \quad (3.53)$$

The integration is carried out on a path connecting the two states W_i and W_j . Usually [33, 34], the path between the two states is taken tangent to the right eigenspaces of the Jacobian matrix Q and is the reunion of three subpathes $\Xi_{\lambda_1}, \Xi_{\lambda_{\kappa+1}}, \Xi_{\lambda_{\kappa+2}}$ where Ξ_{λ} is tangent to the eigenspace associated to λ . Different ways of ordering the eigenvalues of Q may be considered. A priori, the optimum choices seem to be the natural increasing order $\lambda_1 - ra, \lambda_1, \lambda_1 + ra$ or the reverse order. In reference [34], it was shown in the calorically perfect gas case that the definition of Osher's solver combined to the reverse order leads to a numerical flux which respects an entropy inequality for the semi-discrete scheme. We shall use in the sequel the reverse order, but a priori nothing prevents us from using the increasing order.

3.4.5 Osher-type Numerical Flux

Let us denote by $W_{1/3}$ and $W_{2/3}$, the intermediate state of our path :

- $W_{1/3} = \Xi_{\lambda_{\kappa+2}} \cap \Xi_{\lambda_1}$
- $W_{2/3} = \Xi_{\lambda_1} \cap \Xi_{\lambda_{\kappa+1}}$

We shall precise in the sequel the definition of these intermediate states. The eigenvectors associated with $\lambda_{\kappa+1} = r(a - w)$ and $\lambda_{\kappa+2} = r(a + w)$ are genuinely non-linear. So, these two eigenvalues may change their sign at most once in the pathes $\Xi_{\lambda_{\kappa+i}}, i = 1, 2$ [30]. If there exist such points, they are called sonic points and respectively be denoted $W_{1/3}^{sonic}$ in the path $\Xi_{\lambda_{\kappa+2}}$ and $W_{2/3}^{sonic}$ in the path $\Xi_{\lambda_{\kappa+1}}$. For the genuinely non-linear fields, the expression of the integral of the numerical flux can thus be divided in two parts :

$$\int_{\Xi_{\lambda_{\kappa+2}}} |Q(W)| dW = \int_{W_i}^{W_{1/3}} |Q(W)| dW = \int_{W_i}^{W_{1/3}^{sonic}} Q^+(W) dW - \int_{W_{1/3}^{sonic}}^{W_{1/3}} Q^-(W) dW \quad (3.54)$$

From the 1-homogeneity of the flux, we can then deduce that :

$$\begin{aligned} \int_{\Xi_{\lambda_{\kappa+2}}} |Q(W)| dW &= \text{sign}(\lambda_{\kappa+2}(W_i)) \left[F(W_{1/3}^{sonic}) - F(W_i) \right] + \\ &\quad \text{sign}(\lambda_{\kappa+2}(W_{1/3}^{sonic})) \left[F(W_{1/3}) - F(W_{1/3}^{sonic}) \right] \end{aligned} \quad (3.55)$$

where $F(W) = F_1(W)\nu_x + F_2(W)\nu_y$ is the two-dimensional flux (see section 3.4.1).

We obviously can obtain a similar expression for the integral along path $\Xi_{\lambda_{\kappa+1}}$.

For the linearly degenerate field, since λ_1 is a Riemann invariant, it remains constant along path Ξ_{λ_1} . Again from the property of 1-homogeneity of the flux, we can hence write :

$$\int_{\Xi_{\lambda_1}} |Q(W)| dW = \text{sign}(\lambda_1(W_{1/3})) \left[F(W_{2/3}) - F(W_{1/3}) \right] \quad (3.56)$$

These expressions of the numerical flux integrals can then be derived thanks to the Riemann Invariants (see section 3.3.5).

To solve the problem, we thus need the values of ρ , u , v , Y , P , and of the specific internal energy $\epsilon(T, Y)$ at the intermediate states. The knowledge of ρ , u , v , Y , T is sufficient since we can deduce P and $\epsilon(T, Y)$ from T and Y (Y designs the mass fractions vector).

If G_l (or G^l if it is equivocal) designs the value of quantity G at state l , the expressions of the Riemann Invariants lead to the system :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_k^i = Y_k^{1/3} \text{ for } k = 1, \dots, \kappa \\ \\ \frac{R}{M^i} \ln \rho^i + \int_{T_0}^{T_i} \frac{c_v(\tau, Y^i)}{\tau} d\tau = \frac{R}{M^i} \ln \rho^{1/3} + \int_{T_0}^{T_{1/3}} \frac{c_v(\tau, Y^i)}{\tau} d\tau \\ \\ \mu_1 u_i + \mu_2 v_i + \sqrt{\frac{R}{M^i}} \int_{T_0}^{T_i} \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y^i)}}{\gamma(\tau, Y^i) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} = \mu_1 u_{1/3} + \mu_2 v_{1/3} + \sqrt{\frac{R}{M^i}} \int_{T_0}^{T_{1/3}} \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y^i)}}{\gamma(\tau, Y^i) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \\ \\ -\mu_2 u_i + \mu_1 v_i = -\mu_2 u_{1/3} + \mu_1 v_{1/3} \\ \\ \frac{\rho^{1/3} T_{1/3}}{M^i} = \frac{\rho^{2/3} T_{2/3}}{M^j} \\ \\ \mu_1 u_{1/3} + \mu_2 v_{1/3} = \mu_1 u_{2/3} + \mu_2 v_{2/3} \\ \\ Y_k^j = Y_k^{2/3} \text{ for } k = 1, \dots, \kappa \\ \\ \frac{R}{M^j} \ln \rho^j + \int_{T_0}^{T_j} \frac{c_v(\tau, Y^j)}{\tau} d\tau = \frac{R}{M^j} \ln \rho^{2/3} + \int_{T_0}^{T_{2/3}} \frac{c_v(\tau, Y^j)}{\tau} d\tau \\ \\ \mu_1 u_j + \mu_2 v_j - \sqrt{\frac{R}{M^j}} \int_{T_0}^{T_j} \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y^j)}}{\gamma(\tau, Y^j) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} = \mu_1 u_{2/3} + \mu_2 v_{2/3} - \sqrt{\frac{R}{M^j}} \int_{T_0}^{T_{2/3}} \frac{\sqrt{\gamma(\tau, Y^j)}}{\gamma(\tau, Y^j) - 1} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \\ \\ -\mu_2 u_j + \mu_1 v_j = -\mu_2 u_{2/3} + \mu_1 v_{2/3} \end{array} \right. \quad (3.57)$$

where $M^l = \left(\sum_{k=1}^{\kappa} \frac{Y_k^l}{M_k} \right)^{-1}$ is the mean molar mass of the mixture for state $l = i, j$. This non-

linear system admits 8 unknowns: ρ, u, v, T for both states 1/3 and 2/3. Since $c_v = \frac{R}{M(\gamma - 1)}$ is a polynomial function and γ a rational fraction, the integrals appearing in system (3.57) are quadratures, and can be derived. But their expression are far from being easy to handle with. Find an analytical solution of (3.57) is hence out of reach. On the contrary, its numerical resolution seems quite straightforward, for instance by a vectorial Newton method, which initial guess may have been obtained e.g. by the solution of the same system assuming γ to be a constant. This last assumption leads system (3.57) to be reduced to the resolution of a scalar algebraic non-linear equation in $P = P_{1/3} = P_{2/3}$, which can be solved by a pre-conditioned scalar Newton method (cf. [27] and next section).

But, since the Osher scheme is already an approximate Riemann solver (it assumes that the two left and right states can be connected by rarefaction waves only), find the exact

solution of system (3.57) may seem out of practical interest. *From a computational point of view, we can try to limit ourselves to the first step (the resolution of the approximate system) in order to obtain a suitable extension of the Osher's approximate Riemann solver. Indeed, the resolution of the 8-th order exact non-linear system (3.57) is too expensive and reveals itself to be not necessary in the computational tests we made.* We shall precise the used procedure in the next subsection.

3.4.6 Approximate Riemann invariants

As it has been already said in the previous section, if we assume γ to be a constant in the integrals of system (3.57), the new system can then be reduced to the resolution of the following algebraic equation in the intermediate states pressure $P = P_{1/3} = P_{2/3}$ (cf. [30]). Indeed if we replace ρ , u and v for both states 1/3 and 2/3 by their expressions in function of P , in the equation $\mu_1 u_{1/3} + \mu_2 v_{1/3} = \mu_1 u_{2/3} + \mu_2 v_{2/3}$, it comes :

$$\frac{a_i}{\gamma_i - 1} \left[\frac{P}{P_i} \right]^{\frac{\gamma_i - 1}{2\gamma_i}} + \frac{a_j}{\gamma_j - 1} \left[\frac{P}{P_j} \right]^{\frac{\gamma_j - 1}{2\gamma_j}} = \frac{1}{2} (\mu_1 u_i + \mu_2 v_i - \mu_1 u_j - \mu_2 v_j) + \frac{a_i}{\gamma_i - 1} + \frac{a_j}{\gamma_j - 1} \quad (3.58)$$

The preconditioning procedure of equation (3.58) presented in [30] is aimed to be able to choose an initial guess which ensures the rapid convergence of the Newton method for the modified equation.

Once the P value is computed, we can then directly obtain the values of the density, the speed components and of the temperature for both intermediate states, from the equations :

$$\rho_{1/3} = \rho_i \left[\frac{P}{P_i} \right]^{\frac{1}{\gamma_i}} \quad , \quad u_{1/3} = u_i + \mu_1 \frac{2a_i}{\gamma_i - 1} - \frac{2\sqrt{\gamma_i P}}{\sqrt{\rho_{1/3}(\gamma_i - 1)}} \quad (3.59)$$

$$\rho_{2/3} = \rho_j \left[\frac{P}{P_j} \right]^{\frac{1}{\gamma_j}} \quad , \quad v_{1/3} = v_i + \mu_2 \frac{2a_i}{\gamma_i - 1} - \frac{2\sqrt{\gamma_i P}}{\sqrt{\rho_{1/3}(\gamma_i - 1)}} \\ u_{2/3} = u_j + \mu_1 \frac{2a_j}{\gamma_j - 1} - \frac{2\sqrt{\gamma_j P}}{\sqrt{\rho_{2/3}(\gamma_j - 1)}} \quad , \quad T_{1/3} = \frac{PM_i}{\rho_{1/3}R} \quad (3.60)$$

$$v_{2/3} = v_j + \mu_2 \frac{2a_j}{\gamma_j - 1} - \frac{2\sqrt{\gamma_j P}}{\sqrt{\rho_{2/3}(\gamma_j - 1)}} \quad , \quad T_{2/3} = \frac{PM_j}{\rho_{2/3}R}$$

We can then deduce the values of the specific energies at the " approximate intermediate states" from $T_{1/3}$, $T_{2/3}$ and the corresponding mass fractions, and obtain the volumic total energies $e_{1/3}$ and $e_{2/3}$. Finally, the "approximate intermediate states" fluxes vectors are computed from (3.60) and (3.22). •

The same global procedure can also be applied for the derivation of the "approximate" sonic

points. (For the two pathes $\Xi_{\lambda_{\kappa+2}}$ and $\Xi_{\lambda_{\kappa+1}}$, it is sufficient to write that the approximate Riemann invariants are constant on the path and that the corresponding eigenvalue vanishes for this state) •

Remark 9: This last system (3.60) is the system to be solved when computing the Osher flux for a mixture of perfect gases. Assuming γ to be *locally* constant is formally equivalent to take the same Riemann invariants as in the multi-component perfect gases case (see [40, 34]).

3.4.7 An alternate multi-component extension: the "BL" approximate Riemann flux

An alternative approach to compute the numerical fluxes for the species densities is proposed in [23]; it is motivated by the observation that the classical multi-component calorically perfect gas Roe and Osher schemes do not preserve the maximum principle for the mass fractions (that is, these schemes do not preserve the inequalities $0 \leq Y_k \leq 1$, for $k = 1, \dots, \kappa$). On the opposite the fully-coupled Van Leer scheme and the fully-coupled Godunov scheme [14] do preserve the maximum principle for the mass fractions. It is shown in [23] that this feature of the multi-component fully-coupled Godunov scheme is based on the below property 3.61 of the exact solution of the perfect-gases Riemann problem. In one space dimension x , let denote this exact solution $W^{\mathcal{R}}(x, t)$. This well-known solution is self-similar (i.e. $W^{\mathcal{R}}(x, t)$ only depends on the ratio $\frac{x}{t}$). For $\sigma \in \mathbb{R}$ and $t \geq 0$, we will denote $\mathcal{V}(\sigma; W_L, W_R)$ (or sometimes simply $\mathcal{V}(\sigma)$) the value of $W^{\mathcal{R}}(\sigma t, t)$, which is independent of t .

Proposition 3.4.7.1:

For any states W_L and W_R , the following equality holds [23]:

$$F^{\rho Y_k}[\mathcal{V}(0)] = F^{\rho}[\mathcal{V}(0)] \times \begin{cases} Y_L & \text{if } F^1[\mathcal{V}(0)] > 0, \\ Y_R & \text{if } F^1[\mathcal{V}(0)] < 0. \end{cases} \bullet \quad (3.61)$$

Therefore we define approach "BL" as follows for the Roe and Osher schemes, where the flux evaluation is based on an approximate Riemann solver. We evaluate the components of ϕ_{ij} corresponding to the density, momentum and energy. We then compute the flux components for the partial densities from the next relation, which mimics the property (3.61) of the exact solution of the multi-component perfect-gases Riemann problem, extended in the 2-D case [23]:

$$\phi_{ij}^{\rho k}(W_i, W_j, \vec{\eta}_{ij}) = \phi_{ij}^{\rho}(W_i, W_j, \vec{\eta}_{ij}) \times \begin{cases} Y_i & \text{if } \phi_{ij}^{\rho}(W_i, W_j, \vec{\eta}_{ij}) > 0 \\ Y_j & \text{if } \phi_{ij}^{\rho}(W_i, W_j, \vec{\eta}_{ij}) < 0 \end{cases} \quad (3.62)$$

The Godunov scheme [14] is also of this type. Approach "BL" defines an approximate Riemann flux for the whole multi-component system, and uses the same discrete mass fluxes for the species equations and the continuity equation. But the main advantage of this approach is the following: it preserves the maximum principle for the mass fractions. The result shown in [23] is the following:

Proposition 3.4.7.2:

Under the following CFL-like conditions:

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{\max(\phi_{ij}^p, 0)}{\rho_i^n} - \frac{\min(\phi_{ij}^p, 0)}{\rho_j^n} \right] \leq 1 \quad \forall i \text{ and } j \text{ neighbour of } i, \quad (3.63)$$

the schemes of "BL" type preserve the maximum principle for the mass fractions Y_k : for all i and $n \geq 0$:

$$\min_j Y_j^0 \leq Y_i^n \leq \max_j Y_j^0. \bullet \quad (3.64)$$

Remark 10: All our numerical experiments performed using the Roe or Osher schemes have shown that the condition (3.64) is not more restrictive in practice than the usual CFL condition. •

Remark 11: It can be noticed that the numerical flux functions of the "BL" Osher scheme and of the classical and "BL" Roe schemes are not differentiable, whereas the classical flux functions of the Van Leer and Osher schemes are differentiable [23]. •

3.4.8 Boundary Conditions

Let Υ be the boundary of the computational domain. In our case, Υ can be divided in three parts:

$-\Upsilon_B$, subset of Υ where slip conditions are imposed; the speed vector \vec{V} is constrained to remain perpendicular to the normal vector $\vec{\nu}$ of Υ_B . This condition leads to:

$$\vec{V} \cdot \vec{\nu} = 0 \quad \text{or} \quad u\nu_x + v\nu_y = 0 \quad (3.65)$$

which gives:

$$\int_{\Upsilon_B} F_1^B(W)\nu_x + F_2^B(W)\nu_y d\sigma = \int_{\Upsilon_B} F^B d\sigma \quad (3.66)$$

with

$$F^B = \begin{pmatrix} F_k^B = 0 \text{ for } k = 1, \dots, \kappa \\ F_{\kappa+1}^B = \nu_x P \\ F_{\kappa+2}^B = \nu_y P \\ F_{\kappa+3}^B = 0 \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

For doing this calculus, we admit that P has a constant value around each node on the edge of the cell.

$-\Upsilon_I$, subset of Υ where inflow conditions are enforced; the Mach number, the temperature, the pressure, the mass fractions have fixed values on the inlet nodes.

$-\Upsilon_O$, subset of Υ where outflow conditions are assumed. We use a condition for the fluxes between the outcoming nodes and an "infinity" state, given **a priori**. These convective fluxes are computed by using an interior-state fully-upwind Steger and Warming decomposition. More precisely, we shall take :

$$F_\infty = Q^+(W_i)W_i + Q^-(W_i)W_\infty \quad (3.68)$$

where, if $F = F_1(W)\eta_x + F_2(W)\eta_y$, F_∞ is the flux of the external outflow state, the flux F on Υ_O , $Q^\pm = \Gamma\Lambda^\pm\Gamma^{-1}$, and Λ^\pm is the diagonal matrix of the λ_i^\pm with :

$$\lambda_i^+ = \max(0, \lambda_i) \quad \text{and} \quad \lambda_i^- = \min(0, \lambda_i) \quad (3.69)$$

3.5 Second-Order Accuracy

Let us now consider the second-order extensions – in both time and space – of the preceding schemes. Starting from the previous first-order accurate schemes, the second-order accuracy will be obtained by using piecewise linear variables instead of piecewise constant variables, and by evaluating the fluxes ϕ_{ij} at the half time step $n + 1/2$. We follow here the "MUSCL" approach of Van Leer [26]. One of its main advantages is that the numerical flux function is unchanged, but evaluated at different states. The method can be splitted in five steps, at each time level, starting from the values W_i^n :

- 1) Slopes computation : we evaluate slopes for all variables which are choosen to be piecewise linear. Several choices are possible at this stage: for instance, one can choose either the conservative variables ρY_k , ρu , ρv , e or the "physical variables" ρ , u , v , p (or T), Y_k , or also the characteristic variables (see [5]) to vary linearly in each computational cell. We denote \mathcal{W} the vector of the interpolated variables.
- 2) Limitation : slope limiters are used in order to avoid the creation of new extrema; here again different strategies exist to evaluate the limited slopes (see e.g. [12, 4, 6, 8]). In the numerical experiments whose results are reported below, we have used an hermitian gradients limitation technique, generalising the MinMod 1-D limiter (see [13], and the appendix).
- 3) Prediction : the limited slopes are used to advance the solution over a half time step using a centered predictor, setting:

$$\mathcal{W}_i^{n+1/2} = \mathcal{W}_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left[\mathcal{A}(\mathcal{W}_i^n) \mathcal{W}_{i,x}^{n,lim} + \mathcal{B}(\mathcal{W}_i^n) \mathcal{W}_{i,y}^{n,lim} \right] \quad (3.70)$$

where $\mathcal{A}(\mathcal{W}_i^n)$ and $\mathcal{B}(\mathcal{W}_i^n)$ are respectively the Jacobian matrices of the fluxes F_1 and F_2 , written in function of the \mathcal{W} -variables. The expressions of the limited slopes $\mathcal{W}_{i,x}^{n,lim}$ and $\mathcal{W}_{i,y}^{n,lim}$ are given in the appendix. We have therefore used the linear interpolation of \mathcal{W} upon cell C_i at time n to compute its value at time $n + \frac{1}{2}$.

- 4) Cell-interface Values at time $n + \frac{1}{2}$: using again the same slopes (and not recalculating them at time $n + \frac{1}{2}$), we compute cell-interface values at the half-time step:

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{ij}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathcal{W}_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \vec{\nabla} \mathcal{W}_i^{n,lim} \cdot \vec{i} j , \\ \mathcal{W}_{ji}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathcal{W}_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \mathcal{W}_j^{n,lim} \cdot \vec{i} j ,\end{aligned}\tag{3.71}$$

- 5) Correction: lastly, turning back to the conservative variables, we complete the time-step by evaluating W_i^{n+1} , using the upwind numerical flux function ϕ :

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{Area(C_i)} \sum_{j \in \Lambda_i} \phi_{ij}(W_{ij}^{n+\frac{1}{2}}, W_{ji}^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{\eta}_{ij})\tag{3.72}$$

This construction can be applied to any multi-component numerical flux function ϕ . Due to the limitation procedure, the interpolation degenerates to the first order each time two local triangle slopes (see appendix) around a node are of different signs. Moreover, since we have used a centered predictor, the global scheme will not be truly upwind, nor will be able to actually reach second-order accuracy. We shall call it "quasi-second order half upwind" scheme.

Remark 12: It is shown in [23] that the second-order accurate schemes of type "BL" preserve the maximum principle for the mass fraction when the slopes of the *physical* variables are limited, more precisely when the mass fractions Y_k (and not ρY_k) are among the variables which are chosen to vary linearly in each cell with limited slopes. Another point is to choose between the pressure and the temperature. A priori, T seems the natural choice, since all our thermodynamic variables are functions of Y and T . Moreover, some authors [43] have observed numerical oscillations, which may lead to negative values when using the pressure as interpolated variable. For our particular case, using the temperature is not more expensive than using the pressure since we actually need to compute the temperature to obtain the total energy (remember equation (3.4) does not hold in our case). We have tried to use either the pressure or the temperature (and then deduce the other one from the perfect gas law (3.2)) and get equivalent results. That are the reasons why we finally choose the physical variables ρ, u, v, T, Y_k as \mathcal{W} -variables in our numerical experiments, and then deduce the pressure and the energy. •

3.6 Solvers for the Species Conservation Equations

3.6.1 Point-wise resolution

The new system to be solved now is a system of algebraic-differential equations consisting of the κ ordinary differential equations of chemical kinetics for the mass fractions and of the conservation of energy. The unknowns are the temperature T and the vector of mass fractions Y . The system can be written as:

$$\begin{cases} \frac{dY_k}{dt} = \frac{\Omega_k(T, Y, \rho)}{\rho} = \omega_k(T, Y) , \\ e = \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \rho \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \epsilon_k(T) . \end{cases} \quad (3.73)$$

Starting from the values of the conservative variables obtained after the first convective step, the above system is to be integrated along one time-step Δt – the same as in the convective part – in order to obtain the new values T^{n+1} and Y^{n+1} . We insist upon the fact that ρ , u , v , e are hence constant during the integration time.

Remark 13: In the case of a non-reacting flow, the source terms vanish and we only need to solve the last algebraic equation for the temperature. •

Remark 14: Instead of solving the equation of conservation of the energy involving the internal energy, we noticed that solving the following discrete equation involving the enthalpy:

$$e^{n+1} = \frac{1}{2}\rho^{n+1}([u^{n+1}]^2 + [v^{n+1}]^2) + \rho^{n+1} \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k^{n+1} h_k(T^{n+1}) - P^n \quad (3.74)$$

was more stable in term of C.F.L. number limitation. •

For the kind of stiff exothermic chemistry models we plan to use, the integration of the chemical source term cannot be realized directly by a simple implicit or linearized implicit method [41]. A robust multi-step subcycling method is required. Many specialized and efficient O.D.E. or D.A.E. (differential-algebraic equations) solver packages are able to find a sufficiently accurate solution of system (3.73).

In the framework of one cell alone, we first tested the relative performances – for our kind of reacting flows and our particular machines – three of them: LSODE [24], DASSL [44] and LIMEX [28]. The O.D.E solver LSODE and the D.A.E. solver DASSL use a backward differentiation formula (B.D.F.). LIMEX uses an extrapolation method based on the semi-implicit Euler discretization for linearly implicit ODEs, and is an extension of the ODEs solver EULSIM [32], that we also tried.

DASSL and LIMEX solve system (3.73) as a whole, including the algebraic equation for the energy. For LSODE and EULSIM, we wrote an additional routine which computes the

temperature given the mass fractions, thanks to a scalar Newton method. This is formerly equivalent to eliminate the temperature from the differential equations, but may arise other numerical difficulties.

3.6.2 Choice of the package

The chemistry solver module has to be reliable, fast and sufficiently accurate. Giving all the results obtained in the one-cell case with these four packages is not very meaningful. The extrapolation of their relative efficiency to two-dimensional calculations is not relevant. Indeed, it is hard to reproduce in 0-D all the numerical difficulties that might appear during the 2-D computation. The most obvious seems to be the strong temperature gradients near the shocks, that cause unburnt gas to be quickly heated, and hence the combustion process to exponentially start. This means that the characteristic combustion time is then very short compared to the wanted convective time-step size: this is precisely what causes the stiffness of the problem, in particular in the case of realistic large geometries. But the numerical experiences have shown that some other specifically convective phenomena make us unable to directly extend the 0-D results to 2-D calculations, even if they are giving the correct trend.

The final choice is strongly dependent of what the code is asked most at each momemt of the computation: robustness, possibility of using huge time-steps or conserving sufficient accuracy. So, a priori, a good strategy would be to use the locally more adapted package. But, in fact, it is not clear in the complex chemistry two-dimensional case to find some appropriate criteria to decide what package is to be used for one precise situation.

Therefore, we decide to use only one package throughout the whole calculation for the two-dimensionnal tests we performed. It appears that two packages – LSODE and LIMEX – were quite significantly faster and more reliable than the others, DASSL being as fast as LSODE but less robust for our tests; EULSIM is the more accurate but more unstable and slower by a factor of 10 for "stiff" burning situations.

Moreover, in very extreme situations (in the points where the solver failed), the local splitting of the timestep size may also be an efficient strategy, in order to prevent the code from crash and conserve accuracy and reliability.

3.7 Numerical results

We performed two-dimensional computations on various ramp-shaped and smoothed ramp-shaped geometries, for non-structured grids, and using a 9-species-19-reaction chemistry model [21]. The inflow consists in a mixture of hydrogen and air. The air is supposed to be constituted by 1 mole of O_2 for 3.79 moles of N_2 . The equivalence ratio $\frac{\text{number of } H_2 \text{ molecules}}{2 \times \text{number of } O_2 \text{ molecules}}$ will be denoted \mathcal{R} , the incoming temperature, pressure and Mach number by respectively T_0 , P_0 and M_0 . ϕ will design the angle of the ramp or the final angle for the smoothed ramp. L

is the length of the geometry, while W_{max} and W_{min} design the larger and smaller widths. Lastly, N_n and N_e will be the number of nodes and elements of the computational grid.

All the calculations presented on the sequel were performed on an IBM RS-6000 560 WS, using a timestep size based on the convective one, with a constant CFL number of 0.6.

3.7.1 Fifteen-degree Ramp

We first tried the code to solve the inert or reactive flow past a 15-degree ramp. Indeed, it is then possible to derive a semi-analytical solution [15]. This case, referred as case *I*, has been runned with the LSODE solver. It is defined by the following parameters:

Case <i>I</i> : Simple Ramp with or without combustion									
R	ϕ (deg.)	M_0	T_0 (K)	P_0 (atm)	L (cm)	W_{max} (cm)	W_{min} (cm)	N_n	N_e
0.5	15.	7.5	700.	1.0	1.1	0.25	0.14	200×30	11940

The obtained results are presented figures 3.3 to 3.10 (they are not in scale). For the temperatures, the pressure and the Mach number, we compare the reactive case (up) and the non-reactive case (down). The calculation took about 17 hours. About 4 hours were first necessary to reach the second-order solution of the pure convective part of the flow. The L^2 -residual on the four conservative variables was divided by 10^6 in about 2100 explicit iterations (about 1970 iterations to divide the L^2 -residual by a factor of 10^5). We then activated the combustion solver LSODE, coupled with the scalar Newton method for the temperature and divided the maximum residual (obtained after a few iterations) by 10^4 , in about 1200 additional iterations. We only computed the ODE solution for the cell standing behind the shock, that is for those which temperature is above $T_0 + 20$ K. The theoretical solutions behind the shock, for such a configuration and a specific thermochemical model, and assuming no or a complete combustion behind the shock, can be computed following the method described in [15]. We compare in the following tabular both computed and expected results :

Theoretical Results for Case <i>I</i>				
Chemistry	Shock Angle (deg.)	Mach	Temperature (K)	Pressure (atm)
Euler	20.71	4.932	1490.	8.115
Combustion	25.74	3.651	2959.	9.803
Computed Results for Case <i>I</i>				
Chemistry	Shock Angle (deg.)	Mach	Temperature (K)	Pressure (atm)
Euler	20.5 ± 0.5	4.7-5.2	1450.-1545.	7.5-8.2
Combustion	25.5 ± 0.5	3.3-3.8	2700.-2780.	9.0-10.5

The obtained and expected values are in quite good agreement, even if it seemed hard to find a really constant state behind the shock. For the burning case, due to the approximation for

the equilibrium state (only N_2 , O_2 , and H_2O are supposed to be present behind the shock in [15]), we found lesser values for the computed temperature.

3.7.2 Non Reactive Smoothed Ramp

The second case treated (case *II*) deals with a smoothed ramp shaped geometry. This time, we used an adaptive remeshing strategy, based on a multi-level refinement procedure [22]. The grid is considered as a hierarchy of triangles father-sons. Each father is being divided by 4 if a particular criterion is verified. In our case, and in order to give priority to the hot regions, we took $\|T\nabla T\|$ to be greater than a fixed value. In some cases, and in order to preserve the conformity of the finite-element like grid, the father triangle was divided in only two sons. Moreover, we also prevented the size of the triangle from becoming smaller than a fixed value.

Case <i>II</i> : Smoothed Ramp without combustion									
R	ϕ (deg.)	M_0	T_0 (K)	P_0 (atm)	L (cm)	W_{max} (cm)	W_{min} (cm)	N_n	N_e
0.5	30.	2.8	700.	0.1	5.0	4.0	3.12	9805	19380

The results are shown on figures 3.11 to 3.15. If used in order to get a stationary solution, the refinement procedure itself does not take much CPU time. But before getting a satisfying result, some preliminary runs were required to adjust parameters for the criteria. For about 10000 grid points, this pure convective Euler calculation employed about 2.5 hours CPU time for first order accuracy, and about 7 hours for second order accuracy, on an IBM RS-6000 560 WS. This computational time is to be compared with less than 40 mn for a first-order one-component calorically perfect gas flow [25].

3.7.3 Mach Effect

The case *III* is concerned with our main topic: the stabilization of a shock-induced combustion behind a portion of quasi-right shock wave. A preliminary analysis of this kind of configuration for ramps is made in [15]. We are here interested in a 24.6-degree ramp and on the transient flow past it. This third case *III* is defined as follows:

Case <i>III</i> : Mach Effect over a 24.6-degree ramp									
R	ϕ (deg.)	M_0	T_0 (K)	P_0 (atm)	L (cm)	W_{max} (cm)	W_{min} (cm)	N_n	N_e
0.5	24.6	3.2	700.	1.0	5.0	3.0	1.66	112×95	20856

This time, the calculation has been leaded with the LIMEX solver. Previous calculations with similar smoothed-ramp shaped geometries, using the LSODE solver were quite more expensive (about 30 percent). Moreover, the LIMEX package allows us to use larger and more realistic

geometries (cf. other numerical tests). The analysis made in [15] indicates that, with our kind of thermochemical model and with a simplifying assumption for the equilibrium composition, there is no possible stationary solution involving a complete combustion for the state behind the first shock. A “normal” reflection cannot be stable, and we expect the shock structure to include a Mac reflection [15].

However, in this case, the node density seems not to be high enough, or maybe the distance between the first shock is now sufficiently long, and the ignition takes place at the edge of the ramp. The heat release behind this first shock makes then the combustion to get back to the inflow, and the flame is not stabilized in the desired region. We may wonder if this phenomenon is physically correct, or if it is only produced by a numerical artefact, caused by the too high numerical viscosity when using coarse grids. Other ignition instabilities are shown on the following subsection.

Hence, the use of a quite fine grid or of an adaptive mesh strategy seems necessary. But the intricate behaviour of each of these particular reacting flows makes it not clear how to choose the adequate criteria and their bounds, when using adaptive mesh refinement. Indeed, each new calculation requires a specific and expensive computational effort to make the strategy work. The obtained results for this case are shown on figures 3.16 to 3.21.

3.7.4 Ignition instabilities

We also led two other calculations over two 30-degree smoothed ramps. These computations were performed using quite similar inflow conditions, but lead to two very different behaviour. The operating conditions of this fourth case are summarized below :

Case IV a & b: Smoothed Ramp with combustion									
R	ϕ (deg.)	M_0	T_0 (K)	P_0 (atm)	L (cm)	W_{max} (cm)	W_{min} (cm)	N_n	N_e
0.3	30.	2.8	650.	0.1	25.0	20.0	15.6	6720	13098
0.3	30.	3.0	700.	0.1	35.0	28.0	21.8	6720	13098

The case IV.a, with an inflow Mach number equal to 2.8, shows a failed ignition of the mixture. A Mach reflection takes place in the middle of the flow and the steady state is reached after approximately 3800 iterations. The intermediate solutions show a beginning of ignition, but the burning gases reach the outflow and then the steady state is almost the solution of the Euler equations without combustion. For this case, the results are shown figures 3.22 to 3.26.

For the case IV.b, with an inflow Mach number equal to 3.0 and a increased inflow temperature of 700 K, the behaviour is absolutely different. The ignition takes place just behind the first shock caused by the deflection of the flow and seems to go leading to a steady burned state behind this first shock. But, on the same time, another ignition point appears near the “triple point” (the point where the reflected shocks and the contact discontinuity meet). This

“hot point” destabilizes the whole structure and the flame is running back to the inflow. A normal shock wave then appears at the first column of the grid, and cannot go back further. The results are presented figures 3.27 to 3.31.

3.8 Conclusions

We presented here a fractionnal-step method for the simulation of two-dimensional steady or transient combustive flows. The convective part of the system of equations is first resolved by using a quite cheap second-order explicit Riemann solver : we present in some detail a slightly modified version of the multi-component extensions of Roe and Osher Riemann solvers by Abgrall *et al.* [27, 29, 30]. Keeping then the obtained conservative variables fixed, the chemical source term is hence integrated pointwise, using LSODE or LIMEX quite popular packages. In the case of various symmetric ramps or smoothed ramps, we obtained some interesting results about ignition instabilities when trying to obtain the stabilization of a premixed hydrogen-air flame, behind a structure of reflected shock waves involving a Mach reflection and a contact discontinuity. Following the preliminary analysis presented in [15], these results showed that two-dimensionnal effects are to be taken into account, in particular the interaction between the rarefaction wave and the second reflected shock. Moreover, and as expected, we observed that the “triple point”, where the three shocks and the contact discontinuity meet, is a “very hot point”, able to make the combustion front return back to the inflow.

3.9 Appendix

3.9.1 Determination of the eigenvalues and right eigenvectors of Q

Let R_m be the right eigenvector of Q associated to the eigenvalue λ_m . R_m and λ_m verify :

$$(\eta_x A + \eta_y B) R_m = \lambda_m R_m \quad (3.75)$$

Indeed, since for $m = k$, $k = 1, \dots, \kappa$, R_k is equal to ${}^t(0, \dots, 1 \rightarrow k\text{-th column}, \dots, 0, u, v, A_k)$. it follows for QR_k :

$$QR_k = \begin{pmatrix} -wrY_1 + \eta_x uY_1 + \eta_y vY_1 = 0 \\ \vdots \\ wr(1 - Y_k) + \eta_x uY_k + \eta_y vY_k = wr = \lambda_k \\ \vdots \\ -wrY_\kappa + \eta_x uY_\kappa + \eta_y vY_\kappa = 0 \\ \eta_x(-u^2 + P_{\rho_k}) - \eta_y uv + u(2u\eta_x + v\eta_y + \eta_x P_{\rho u}) \\ + v(\eta_x P_{\rho v} + \eta_y u) + A_k \eta_x P_e \\ \eta_y(-v^2 + P_{\rho_k}) - \eta_x uv + u(\eta_y P_{\rho u} + \eta_x v) \\ + v(2v\eta_y + u\eta_x + \eta_y P_{\rho v}) + A_k \eta_y P_e \\ wr(-\mathcal{H} + P_{\rho_k}) + u(\eta_x \mathcal{H} + wr P_{\rho u}) \\ + v(\eta_y \mathcal{H} + wr P_{\rho v}) + A_k wr(1 + P_e) \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

After some algebra, one can find for the $\kappa + 1$, $\kappa + 2$, $\kappa + 3$ -th components of R_k :

$$\begin{cases} R_k^{\kappa+1} = \eta_x(P_{\rho_k} + uP_{\rho u} + vP_{\rho v}) + uwr + A_k \eta_x P_e \\ R_k^{\kappa+2} = \eta_y(P_{\rho_k} + uP_{\rho u} + vP_{\rho v}) + vwr + A_k \eta_y P_e \\ R_k^{\kappa+3} = wr(P_{\rho_k} + uP_{\rho u} + vP_{\rho v}) + wr A_k(1 + P_e) \end{cases} \quad (3.77)$$

thus, if

$$A_k = - \frac{P_{\rho_k} + uP_{\rho u} + vP_{\rho v}}{P_e}, \quad (3.78)$$

we found that $QR_k = \lambda_k R_k$, for $k = 1, \dots, \kappa$. •

In a similar way, since $R_{\kappa+1} = {}^t(Y_1, \dots, Y_k, \dots, Y_\kappa, u - \mu_1 a, v - \mu_2 a, \mathcal{H} - aw)$, it is straightforward to show that the k -th component of $Q R_{\kappa+1}$ can be written as $-wrY_k(Y_1 + \dots + Y_k + \dots + Y_\kappa) + wrY_k + (u - a\mu_1)\eta_x Y_k + (v - a\mu_2)\eta_y Y_k = Y_k r w - aY_k(\mu_1 \eta_x + \mu_2 \eta_y) = Y_k r w - aY_k r = Y_k(\lambda_1 - ar) = \lambda_{\kappa+1} Y_k$ •

Some quite heavy but simple calculations allow us to verify the relation $(Q R_m)_l = \lambda_m R_{m,l}$ for the three last components of $R_{\kappa+1}$, as well as for the vectors $R_{\kappa+2}$ and $R_{\kappa+3}$ •.

3.9.2 Partial derivatives of the pressure and the temperature

In this section, we derive the expressions of the partial derivatives with respect to the conservative variables of the pressure and the temperature. These expressions are involved in the derivation of the Jacobian matrix and of the scalar products.

Determination of P_{ρ_k} and T_{ρ_k}

The equation we are starting from is the perfect gas law (3.2):

$$P = \sum_{k=1}^{\kappa} \rho_k \frac{RT}{M_k}$$

Differentiating it with respect to ρ_k , it comes:

$$P_{\rho_k}]_{\rho_m, \rho u, \rho v, e} = \frac{RT}{M_k} + \sum_{l=1}^{\kappa} \frac{\rho_l}{M_l} RT_{\rho_k} \quad (3.79)$$

On the other hand, from the equation of state (3.3), it comes:

$$P = \frac{1}{2} \rho^{-1} (\rho^2 u^2 + \rho^2 v^2) + \sum_{l=1}^{\kappa} \rho_l h_l(T) - e \quad (3.80)$$

By differentiating this last equality with respect to ρ_k , we get:

$$P_{\rho_k}]_{\rho_m, \rho u, \rho v, e} = P_{\rho_k} = -\frac{1}{\rho^2} (\rho^2 u^2 + \rho^2 v^2) + h_k(T) + \sum_{l=1}^{\kappa} \rho_l h_{l,T} T_{\rho_k} \quad (3.81)$$

and for $c_{p_k} = h_{k,T}$ and $\rho c_p = \sum_{l=1}^{\kappa} \rho_l h_{l,T}$, it comes for P_{ρ_k} , by comparison of these two expressions 3.81 and (3.79):

$$\rho c_v T_{\rho_k}]_{\rho_m, \rho u, \rho v, e} = \frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h_k(T) + \frac{RT}{M_k} \quad (3.82)$$

and by substituting the found value of T_{ρ_k} into 3.79, it finally comes:

$$P_{\rho_k}]_{\rho_m, \rho u, \rho v, e} = (\gamma - 1) \left[\frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h_k(T) + \frac{\gamma RT}{M_k(\gamma - 1)} \right] \bullet \quad (3.83)$$

Derivation of $P_{\rho u}$, $P_{\rho v}$, P_e , $T_{\rho u}$, $T_{\rho v}$ and T_e

The approach is still the same. We start from the perfect gas law (3.2) and differentiate it with respect to ρu . It comes:

$$P_{\rho u}]_{\rho_k, \rho v, e} = \frac{\rho R T_{\rho u}]_{\rho_k, \rho v, e}}{M} \quad (3.84)$$

Again, by differentiating (3.3) with respect to ρu , and substituting the above value for $T_{\rho u}]_{\rho_k, \rho v, e}$ we get:

$$P_{\rho u}]_{\rho_k, \rho v, e} = P_{\rho u} = \frac{2\rho u}{2\rho} + \sum_{l=1}^{\kappa} \rho_l h_{l,T} T_{\rho u}]_{\rho_k, \rho v, e} = u + \frac{\rho c_p M P_{\rho u}}{\rho R} = P_{\rho u}]_{\rho, \rho v, e} = u + \frac{\gamma}{\gamma - 1} P_{\rho u} \quad (3.85)$$

and finally :

$$P_{\rho u} = -(\gamma - 1)u \bullet \quad (3.86)$$

We deduce from (3.86) and (3.84) that :

$$T_{\rho u} = -(\gamma - 1)\frac{uM}{\rho R} \bullet \quad (3.87)$$

In the same way:

$$P_{\rho v} = -(\gamma - 1)v \bullet \quad (3.88)$$

and :

$$T_{\rho v} = -(\gamma - 1)\frac{vM}{\rho R} \bullet \quad (3.89)$$

The derivation for P_e and T_e can also be made by the same approach. It comes :

$$P_e = \gamma - 1 \bullet \quad (3.90)$$

and :

$$T_e = (\gamma - 1)\frac{T}{P} \bullet \quad (3.91)$$

3.9.3 Derivation of the scalar products

In this section, we derive the expressions for $\nabla_W \lambda_k R_k$, for $k = 1, \dots, \kappa$. The aim is to verify that the eigenvectors associated to λ_1 are linearly degenerate, while those associated to the two other eigenvalues $\lambda_{\kappa+1} = \lambda_1 - a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}$ and $\lambda_{\kappa+2} = \lambda_1 + a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}$ are genuinely non linear in our case.

Field associated with λ_1

The gradient (with respect to W) of the eigenvalue :

$$\lambda_1 = \lambda_\kappa = \frac{\eta_x \rho u + \eta_y \rho v}{\rho} = \frac{\eta_x W_{\kappa+1} + \eta_y W_{\kappa+2}}{\sum_{k=1}^{\kappa} W_k} \quad (3.92)$$

is given by :

$$\nabla_W \lambda_1 = \frac{1}{\rho} {}^t(-\lambda_1, \dots, -\lambda_1, \dots, -\lambda_1, \eta_x, \eta_y, 0) \quad (3.93)$$

The eigenvectors associated with λ_1 are given by the first κ and the last column of the matrix Γ (3.31). The k -th vector, for $k = 1, \dots, \kappa$, is given by :

$$R_k = {}^t(0, \dots, 1 \rightarrow k\text{-th column}, \dots, 0, u, v, A_k) \quad (3.94)$$

where A_k is given by (3.34). The scalar product is then equal to :

$$\nabla_W \lambda_1 \cdot R_k = \nabla_W \lambda_k \cdot R_k = \frac{1}{\rho} (-\lambda_1 + \eta_x u + \eta_y v) = 0 \quad (3.95)$$

The last column vector is given by :

$$R_{\kappa+3} = {}^t(0, \dots, 0, \dots, 0, -\mu_2, \mu_1, -\mu_2 u + \mu_1 v) \quad (3.96)$$

The scalar product $\nabla_W \lambda_1 \cdot R_{\kappa+3}$ is equal to :

$$\nabla_W \lambda_1 \cdot R_{\kappa+3} = \frac{1}{\rho} (-\mu_2 \eta_x + \mu_1 \eta_y) = 0 \quad (3.97)$$

from the expressions of μ_1 and μ_2 given by (3.32).

From the equalities (3.95) and (3.97), we deduce that the field associated to λ_1 is linearly degenerate. •

Remark : Since the eigenvector space associated to λ_1 is multi-dimensional, we could also have used directly the more general following result ([9]) :

For a non-strictly hyperbolic system of conservation laws, the field associated to a multiple eigenvalue is linearly degenerated. •

Field associated with $\lambda_{\kappa+1}$

The eigenvalue $\lambda_{\kappa+1}$ is equal to $\lambda_{\kappa+1} = \lambda_1 - \tilde{a}$ where $\tilde{a} = a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2} = ar$ and $a^2 = \frac{\gamma RT}{M} = \frac{\gamma P}{\rho}$.

The aim is to derive $\nabla_W (\lambda_1 - \tilde{a}) \cdot R_{\kappa+1}$. The vector $R_{\kappa+1}$ is equal to :

$$R_{\kappa+1} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_k \\ \vdots \\ Y_\kappa \\ u - a\mu_1 \\ v - a\mu_2 \\ \mathcal{H} - a(\mu_1 u + \mu_2 v) \end{pmatrix} \quad (3.98)$$

with $\mathcal{H} = \frac{e + P}{\rho} = \frac{1}{2}(u^2 + v^2) + h$.

★ Derivation of $\nabla_W \lambda_1 \cdot R_{\kappa+1}$.

From the expression of $\nabla_W \lambda_1$ (3.93) and the above expression of $R_{\kappa+1}$, it comes :

$$\nabla_W \lambda_1 \cdot R_{\kappa+1} = \frac{1}{\rho} (-\lambda + \eta_x(u - a\mu_1) + \eta_y(v - a\mu_2)) = -\frac{\tilde{a}}{\rho} = -\frac{ar}{\rho} \bullet \quad (3.99)$$

The derivation of the gradient of \tilde{a} requires the expressions of $\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial W_k} \right|_{W_m, m \neq k}$.

★ Derivation of $\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k}$

We start from $\tilde{a} = r \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$. Differentiating this expression with respect to ρ_k leads to :

$$\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k} = \frac{1}{2} r \sqrt{\frac{\rho}{\gamma P}} \frac{\partial \gamma P \rho^{-1}}{\partial \rho_k} \quad (3.100)$$

Continuing the calculation of the successive partial derivatives gives (we omit to precise that the derivatives are taken holding constant the other conservative variables) :

$$\frac{\partial \gamma P \rho^{-1}}{\partial \rho_k} = \frac{\rho \frac{\partial \gamma P}{\partial \rho_k} - \gamma P}{\rho^2} \quad (3.101)$$

$$\frac{\partial \gamma P}{\partial \rho_k} = P \frac{\partial \gamma}{\partial \rho_k} + \gamma \frac{\partial P}{\partial \rho_k} \quad (3.102)$$

For the derivation of $\frac{\partial \gamma}{\partial \rho_k}$, we now need to precise what quantities are held constant.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \gamma(T, \rho_m)}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k} &= \left. \frac{\partial \gamma}{\partial T} \right]_{W_m, m=1, \dots, \kappa+3} \left. \frac{\partial T}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k} + \left. \frac{\partial \gamma}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k, T} \\ &= \gamma' T_{\rho_k} + \left. \frac{\partial \gamma}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k, T} \end{aligned} \quad (3.103)$$

The last term of the right hand side of this last equality is equal to :

$$\left. \frac{\partial \gamma}{\partial \rho_k} \right]_{W_m, m \neq k, T} = \frac{c_p^k c_v - c_p c_v^k}{c_v^2} \quad (3.104)$$

Substituting the found values of the partial derivatives, we get :

$$\frac{\partial \gamma P}{\partial \rho_k} = \left[\gamma' T_{\rho_k} + \frac{c_p^k c_v - c_p c_v^k}{c_v^2} \right] P + \gamma P_{\rho_k} \quad (3.105)$$

and :

$$\frac{\partial \gamma P \rho^{-1}}{\partial \rho_k} = \frac{\rho P \left[\gamma' T_{\rho_k} + \frac{c_p^k c_v - c_p c_v^k}{c_v^2} \right] + \rho \gamma P_{\rho_k} - \gamma P}{\rho^2} \quad (3.106)$$

The sum of the first κ terms of the scalar product is equal to :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho_k} &= \frac{1}{2} \frac{r}{a \rho^2} \left[\rho P \left(\gamma' \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k T_{\rho_k} + \frac{c_p c_v - c_p c_v^k}{c_v^2} \right) + \rho \gamma \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k P_{\rho_k} - \gamma P \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{r}{a \rho^2} \left[\frac{\rho P \gamma'}{\rho c_v} \left(\frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h + \frac{RT}{M} \right) + \rho \gamma (\gamma - 1) \left(\frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h \right) \right. \\ &\quad \left. + \rho \gamma^2 \frac{RT}{M} - \gamma P \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{r}{a \rho^2} \left[\left(\frac{P \gamma'}{c_v} + \rho \gamma (\gamma - 1) \right) \left(\frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h \right) + \gamma' \frac{P R T'}{M c_v} + \gamma (\gamma - 1) P \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{r}{a \rho^2} \left[\left(\gamma' (\gamma - 1) \frac{P M}{R} + \rho \gamma (\gamma - 1) \right) \left(\frac{1}{2} (u^2 + v^2) - h \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \gamma'(\gamma - 1) \frac{MP^2}{\rho R} + \gamma(\gamma - 1)P \Big] \\
& = \frac{1}{2} \frac{r(\gamma - 1)}{a\rho} \left[(T\gamma' + \gamma) \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h \right) + \frac{PT\gamma'}{\rho} + \frac{\gamma P}{\rho} \right] \quad (3.107)
\end{aligned}$$

and, finally it comes :

$$\sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho_k} = \frac{1}{2} \frac{r(\gamma - 1)}{a\rho} (T\gamma' + \gamma) \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h + \frac{P}{\rho} \right) \bullet \quad (3.108)$$

★ Derivation of $\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho u} \right]_{\rho_k, \rho v, e}$ and $\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho v} \right]_{\rho_k, \rho u, e}$

The steps of the calculation are very similar to the previous derivation. We are still starting from $\tilde{a} = r \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$. If we differentiate this expression with respect to ρ_u , and keep the same

notations as for the derivation of $\frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho_k}$, it comes :

$$\frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho u} = \frac{r}{2a} \frac{\partial \gamma P \rho^{-1}}{\partial \rho u} = \frac{r}{2a\rho} (\gamma' T_{\rho u} P + \gamma P_{\rho u}) \quad (3.109)$$

A similar expression can be derived for $\frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho v}$. The sum of the $\kappa + 1$ -th and $\kappa + 2$ -th term of the scalar product $\nabla_W \tilde{a} \cdot R_{\kappa+1}$ is then equal to :

$$\frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho u} \cdot (u - a\mu_1) + \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \rho v} \cdot (v - a\mu_2) = -\frac{r(\gamma - 1)}{2a\rho} (T\gamma' + \gamma) (u(u - a\mu_1) + v(v - a\mu_2)) \quad (3.110)$$

★ Derivation of $\left. \frac{\partial \tilde{a}}{\partial e} \right]_{\rho_k, \rho u, \rho v}$

Once again :

$$\frac{\partial \tilde{a}}{\partial e} = \frac{r}{2a} \frac{\partial \gamma P \rho^{-1}}{\partial e} = \frac{r}{2a\rho} (\gamma' T_e P + \gamma P_e) \quad (3.111)$$

Substituting the quantities T_e and P_e by their respective values (see eq.3.90 and 3.91) yields for the sum of the three last terms of the scalar product $\nabla_W \tilde{a} \cdot R_{\kappa+1}$:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=\kappa+1}^{\kappa+3} \frac{\partial \tilde{a}}{\partial W_k \cdot R_{\kappa+1}^k} & = -\frac{r(\gamma - 1)}{2a\rho} (T\gamma' + \gamma) \\
& \quad \left(-\frac{e + P}{\rho} + a(\mu_1 u + \mu_2 v) + u^2 - au\mu_1 + v^2 - av\mu_2 \right) \\
& = -\frac{r(\gamma - 1)(T\gamma' + \gamma)}{2a\rho} \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h \right) \quad (3.112)
\end{aligned}$$

★ Total sum

Finally, the sum of all the terms of the product $\nabla_W (\lambda_1 - \tilde{a}) \cdot R_{\kappa+1}$ is given by :

$$\begin{aligned}
\nabla_W (\lambda_1 - \tilde{a}) \cdot R_{\kappa+1} & = -\frac{(\gamma - 1)r}{2a\rho} (\gamma' T + \gamma) \times \frac{\gamma}{\gamma} \left[\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h + \frac{P}{\rho} - \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) - h \right) \right] \\
& \quad + \nabla_W \lambda_1 \cdot R_{\kappa+1} \\
& = -\frac{(\gamma - 1)\tilde{a}}{2\rho} \left(1 + \frac{\gamma' T}{\gamma} \right) - \frac{\tilde{a}}{\rho} \quad (3.113)
\end{aligned}$$

and the result is:

$$\nabla_W \lambda_{\kappa+1} \cdot R_{\kappa+1} = -\frac{(\gamma+1)\tilde{a}}{2\rho} \left(1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{T\gamma'}{\gamma} \right) \bullet \quad (3.114)$$

For the product $\nabla_W \lambda_{\kappa+2} \cdot R_{\kappa+2}$, it is sufficient to change \tilde{a} in $-\tilde{a}$ in the above relation (3.114), since $\lambda_{\kappa+2}(\tilde{a}) = \lambda_{\kappa+1}(-\tilde{a})$ and $R_{\kappa+2}(\tilde{a}) = R_{\kappa+1}(-\tilde{a})$. The relation is immediate:

$$\nabla_W \lambda_{\kappa+2} \cdot R_{\kappa+2} = \frac{(\gamma+1)\tilde{a}}{2\rho} \left(1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{T\gamma'}{\gamma} \right) \bullet \quad (3.115)$$

where $\gamma' = \left. \frac{\partial \gamma}{\partial T} \right]_{W_k, k=1, \dots, \kappa}$ is equal to:

$$\gamma' = \left. \frac{\partial \frac{c_p}{c_v}}{\partial T} \right]_{W_k, k=1, \dots, \kappa} = \frac{c_{p,T} c_v - c_{v,T} c_p}{c_v^2} \quad (3.116)$$

From Mayer's relation, we can deduce:

$$c_{p,T} - c_{v,T} = \left(\frac{R}{M} \right)_{,T} = 0 \quad (3.117)$$

since the ρ_k are held constant, and hence:

$$\gamma' = -\frac{R c_{v,T}}{M c_v^2} = -\frac{(\gamma-1) c_{v,T}}{c_v} \quad (3.118)$$

If $c_{v,T}$ is negative, the term $\vartheta = 1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{T\gamma'}{\gamma}$ can never be zero and the two fields associated with $R_{\kappa+1}$ and $R_{\kappa+2}$ are genuinely non linear. But in general, for gas mixtures, $c_{v,T}$ is positive and ϑ may a priori vanish. Indeed, for our kind of reacting flows, the ratio $\vartheta - 1 = \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{T\gamma'}{\gamma}$ does not exceed a few percents in absolute value and the result of genuine nonlinearity for the two fields associated to $R_{\kappa+1}$ and $R_{\kappa+2}$ holds. •

3.9.4 Expression of W in the eigenvectors basis

We are looking for ψ_m , $m = 1, \dots, \kappa + 3$, such as:

$$W = \sum_{m=1}^{\kappa+3} \psi_m R_m \quad (3.119)$$

the R_m denoting the eigenvectors of the Q matrix.

The linear system to be solved can then be written as:

$$\left\{ \begin{array}{l} W_k = \psi_k + (\psi_{\kappa+1} + \psi_{\kappa+2})Y_k \quad \text{for } k = 1, \dots, \kappa \\ W_{\kappa+1} = u \sum_{k=1}^{\kappa+2} \psi_k + a\mu_1(\psi_{\kappa+2} - \psi_{\kappa+1}) - \mu_2\psi_{\kappa+3} \\ W_{\kappa+2} = v \sum_{k=1}^{\kappa+2} \psi_k + a\mu_2(\psi_{\kappa+2} - \psi_{\kappa+1}) + \mu_1\psi_{\kappa+3} \\ W_{\kappa+3} = \sum_{k=1}^{\kappa} A_k\psi_k + \mathcal{H}(\psi_{\kappa+1} + \psi_{\kappa+2}) + (-\mu_2u + \mu_1v)\psi_{\kappa+3} + aw(\psi_{\kappa+2} - \psi_{\kappa+1}) \end{array} \right. \quad (3.120)$$

A straightforward calculation gives the solution of system (3.120), which is equal to :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_k = W_k - Y_k\xi \quad \text{for } k = 1, \dots, \kappa \\ \psi_{\kappa+1} = \frac{1}{2}(\xi + \delta) \\ \psi_{\kappa+2} = \frac{1}{2}(\xi - \delta) \\ \psi_{\kappa+3} = -\chi(\mu_1v - \mu_2u) - \mu_2W_{\kappa+1} + \mu_1W_{\kappa+2} \end{array} \right. \quad (3.121)$$

$$\text{with } \chi = \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} W_k, \xi = \frac{\chi(u^2 + v^2) - \sum_{k=1}^{\kappa} A_k W_k - uW_{\kappa+1} - vW_{\kappa+2} + W_{\kappa+3}}{\mathcal{H} - \sum_{k=1}^{\kappa} A_k Y_k} \text{ and } \delta = \frac{\chi w - \mu_1 W_{\kappa+1} - \mu_2 W_{\kappa+2}}{a}.$$

3.9.5 Hermitian Gradients limitation technique

Slopes Approximation

The vector of the variables to be interpolated is denoted \mathcal{W} . If we consider the classical linear-by-element P1-Lagrange base functions, each gradient is a constant vector for each triangle. We then first derive the expression of the gradient for the node number i , denoted $\vec{\nabla}\mathcal{W}_i$:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\mathcal{W}_i &= \frac{\int \int_{C_i} \vec{\nabla}\mathcal{W}\psi \, dx \, dy}{\int \int_{C_i} dx \, dy} \\ &= \frac{1}{\text{Area}(C_i)} \sum_{T, i \in T} \frac{\text{Area}(T)}{3} \sum_{m=1}^3 \mathcal{W}_{i^m} \vec{\nabla}\psi_{i^m}(T), \end{aligned} \quad (3.122)$$

where the i^m , $m = 1, 2, 3$ are the three vertices of triangle T and $\vec{\nabla}\psi_{i^m}(T)$ is the constant gradient vector of the P1-base function in i^m . The limitation procedure is then realized for

each element. If we denote :

$$\vec{\nabla} \mathcal{W}_T = \begin{pmatrix} \mathcal{W}_{T,x} \\ \mathcal{W}_{T,y} \end{pmatrix} \quad (3.123)$$

the gradient of \mathcal{W} computed for one of the triangles around node i , the limited slope in the x direction will be given by the following formula:

$$\mathcal{W}_x^{lim} = \frac{1}{2} \left(\min_{T,i \in T} \text{sign}(\mathcal{W}_{T,x}) + \max_{T,i \in T} \text{sign}(\mathcal{W}_{T,x}) \right) \min_{T,i \in T} |\mathcal{W}_{T,x}| . \quad (3.124)$$

and a similar expression for the y direction. Indeed, the introduction of a such limiter will bring back the solution to the first order as soon as two slopes are of different signs for two triangles around a vertex. This is likely to happen near the shocks or discontinuities. It then becomes necessary to locally increase the node density in order to accurately compute the discontinuity.

Derivation of the prediction step

The system of the non-reactive Euler equations – system (3.1) without source terms – can also be written in a non-conservative form, with respect to the "physical" variables ρ , u , v , T , Y_k :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{k,t} + uY_{k,x} + vY_{k,y} = 0 , \\ \rho_t + u\rho_x + v\rho_y + \rho(u_x + v_y) = 0 , \\ u_t + uu_x + vu_y + \frac{P_x}{\rho} = 0 , \\ v_t + uv_x + vv_y + \frac{P_y}{\rho} = 0 , \\ T_t + uT_x + vT_y + (\gamma(T, Y) - 1)T(u_x + v_y) = 0 , \end{array} \right. \quad (3.125)$$

When executing the prediction step, this allows us to directly get the discrete equation (3.70) by replacing in the above system (3.125) the space derivatives by the computed limited slopes, and the time derivatives of the variables by the discrete approximation $\frac{\mathcal{W}_i^{n+1/2} - \mathcal{W}_i^n}{\frac{\Delta t}{2}}$. Of course, the variables themselves are evaluated at node i and time n .

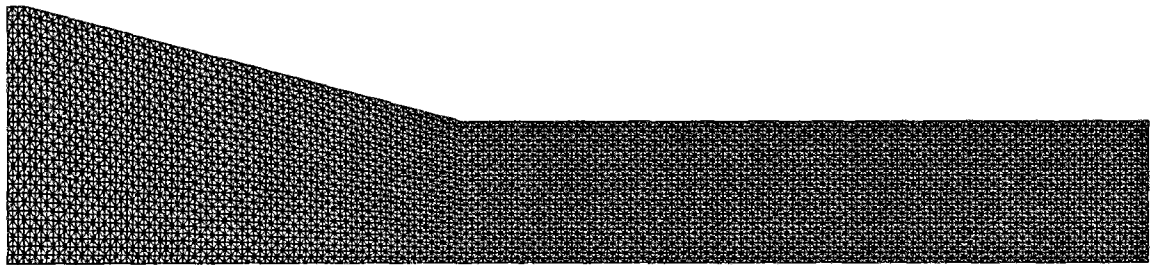
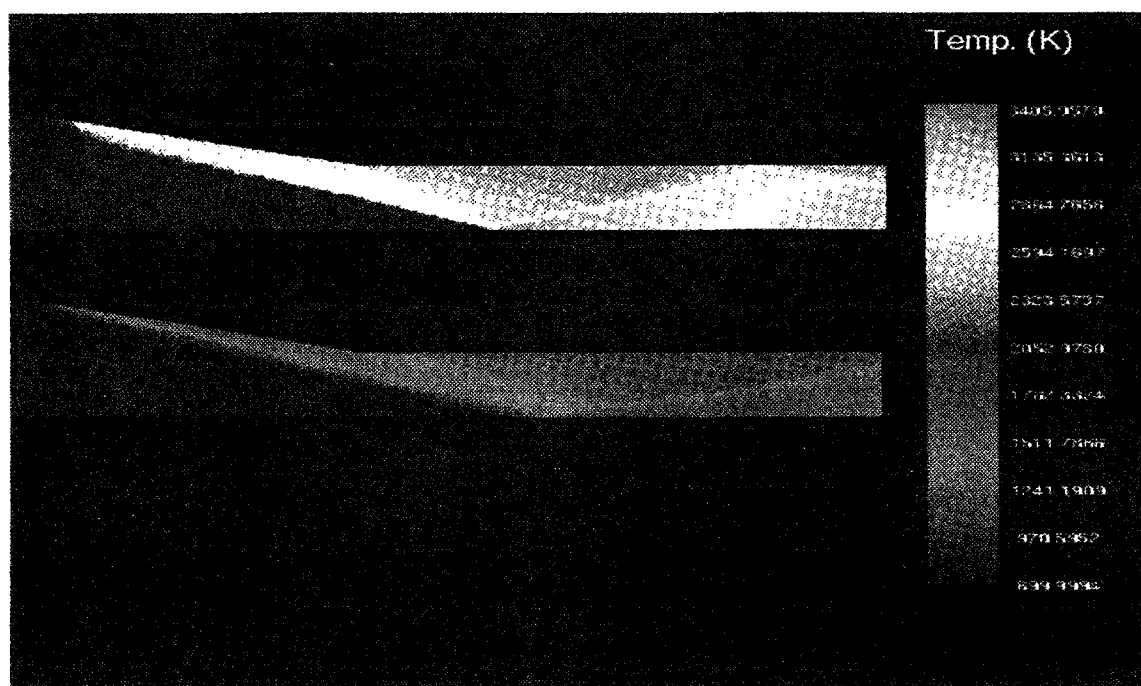


FIG. 3.3 - *Case I : Computational grid 200×30 nodes*

FIG. 3.4 - *Case I: Temperature (K)*

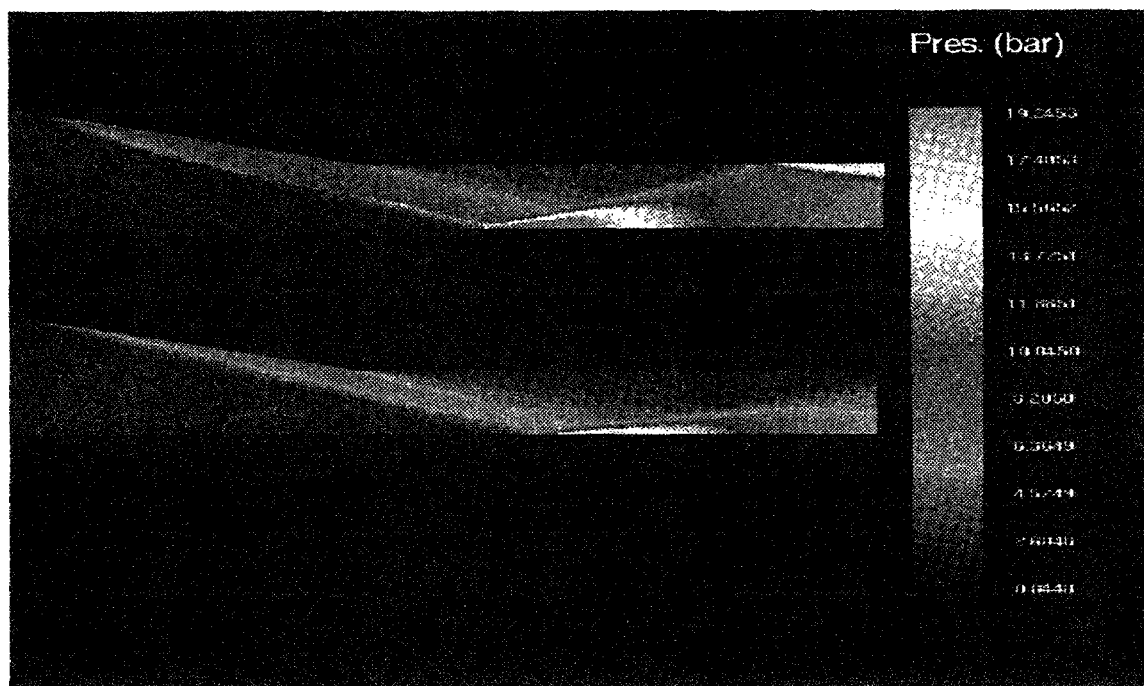
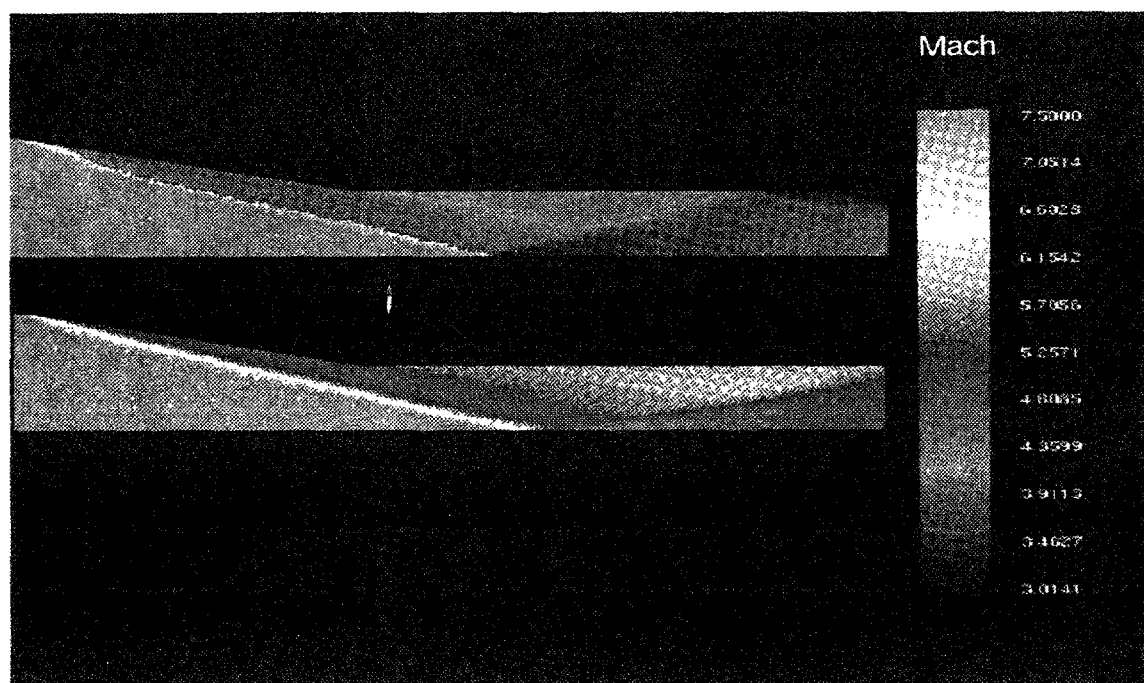
FIG. 3.5 - Case I : Pressure (10^5 Pa)

FIG. 3.6 - Case I : Mach number

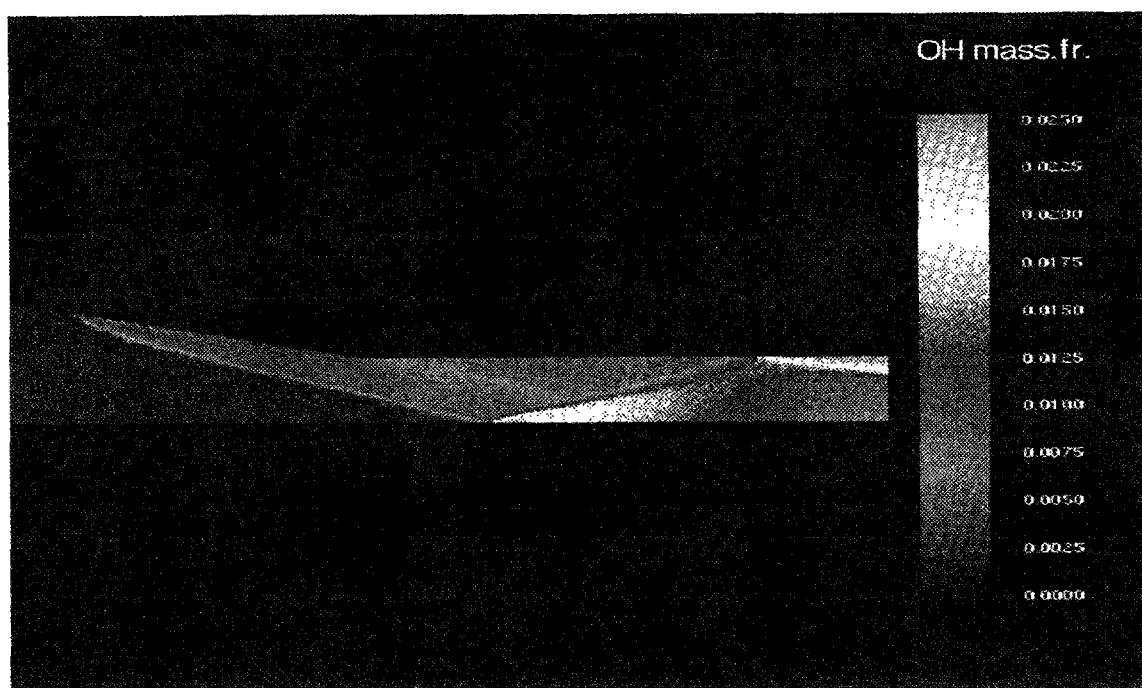
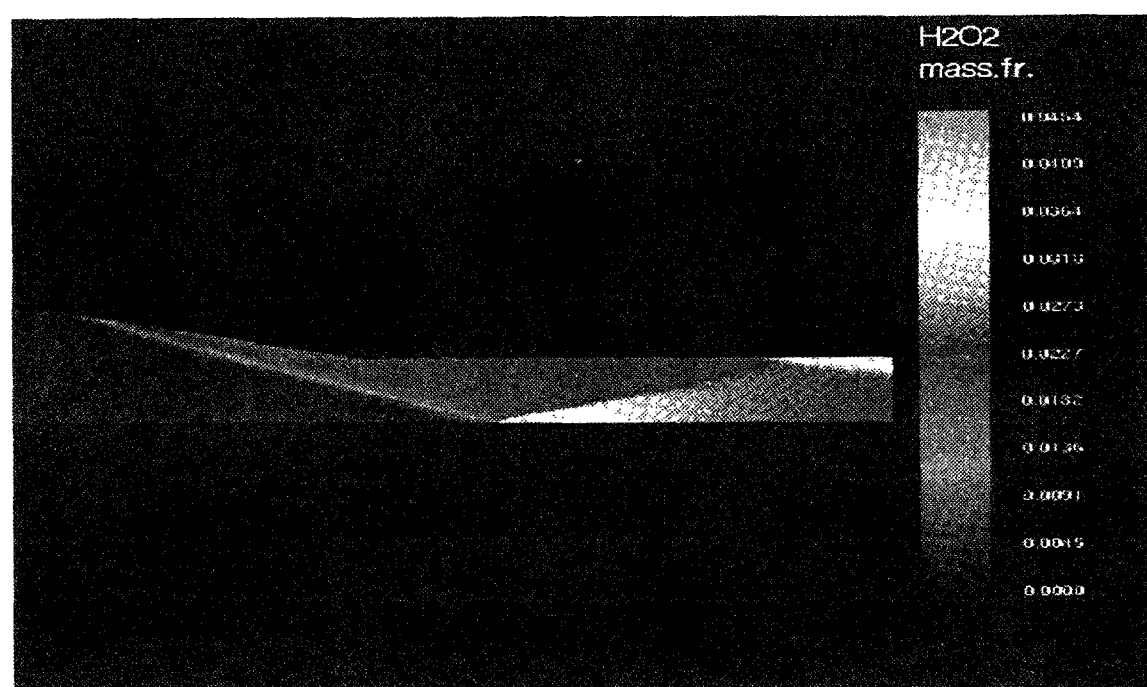
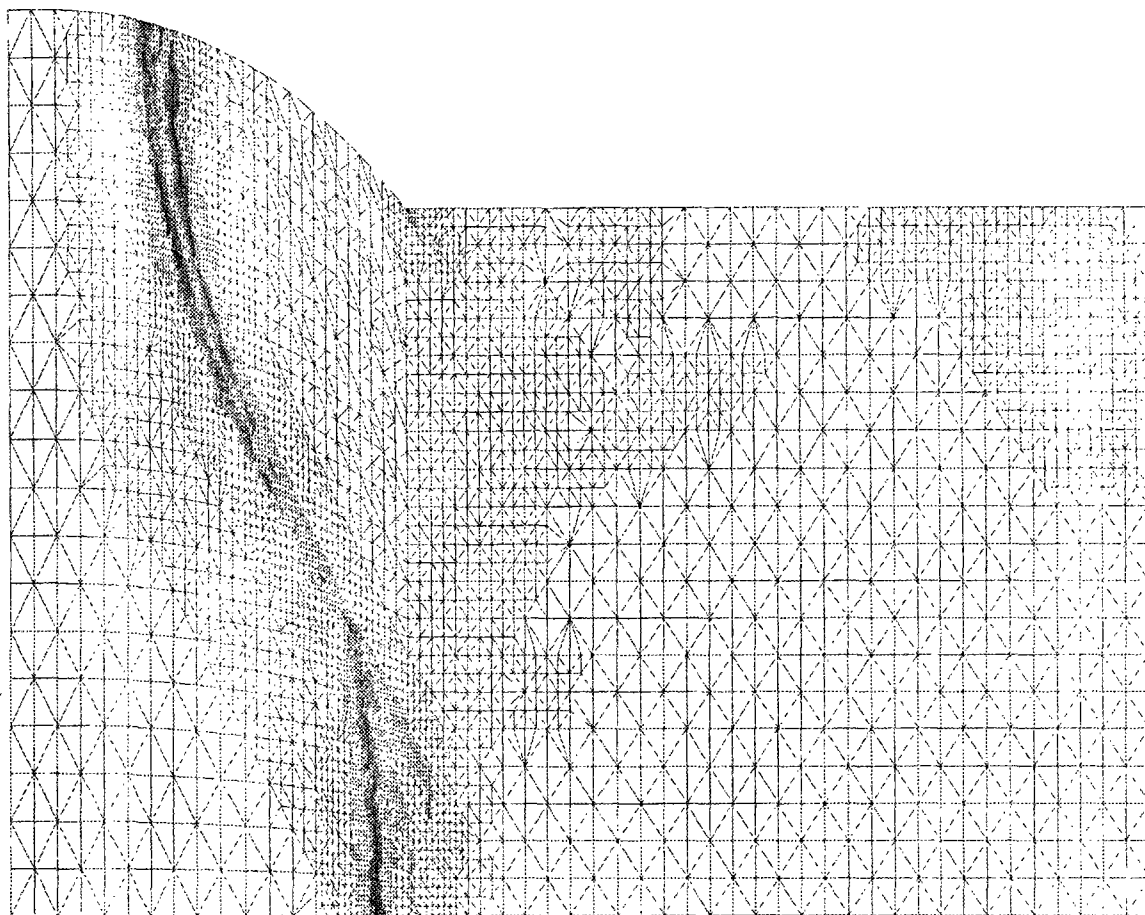


FIG. 3.9 - Case I : OH mass fraction

FIG. 3.10 - Case I : H_2O_2 mass fraction

FIG. 3.11 - *Case II: Computational grid*

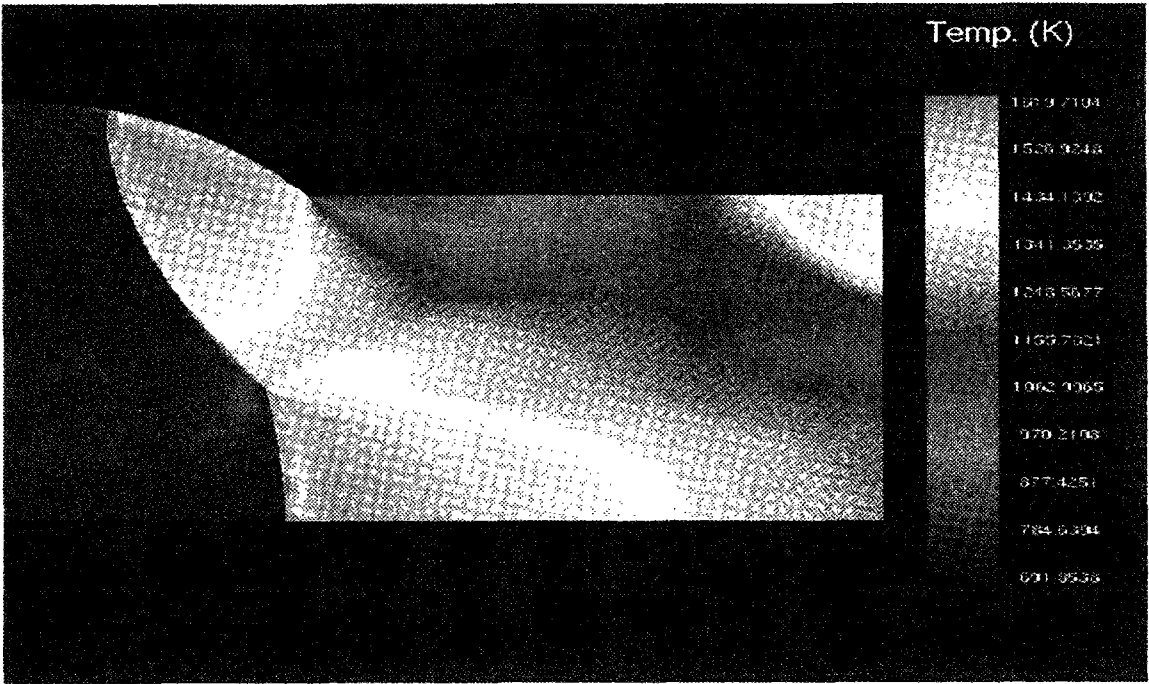


FIG. 3.12 - *Case II : Temperature (K)*

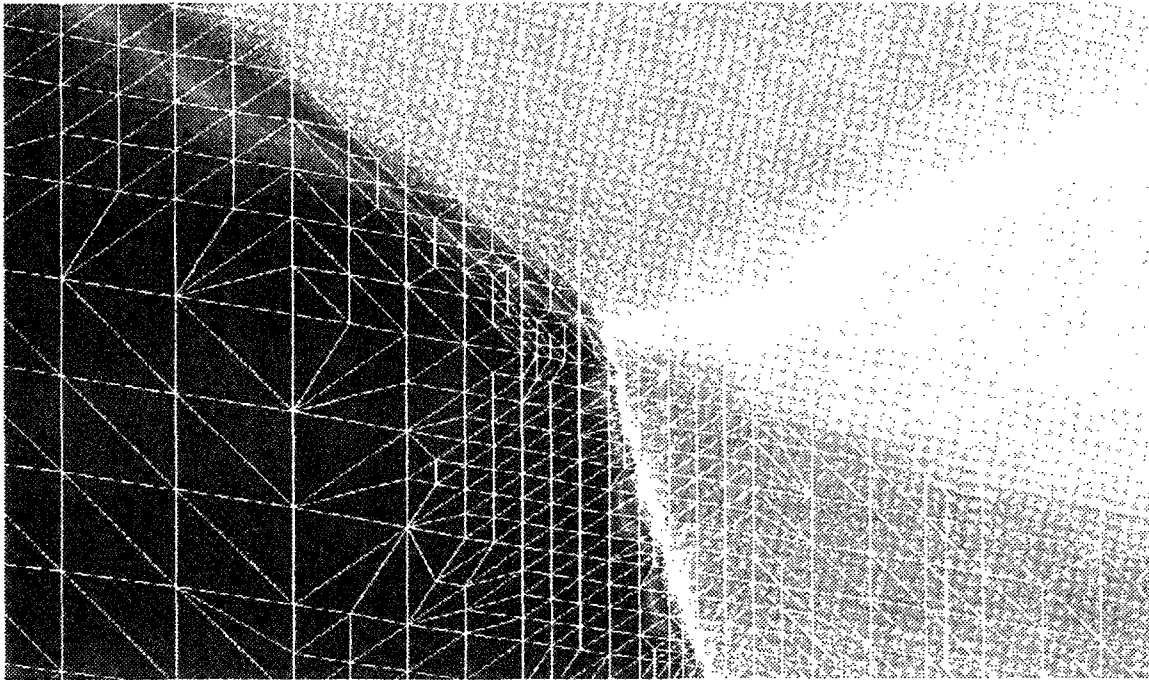
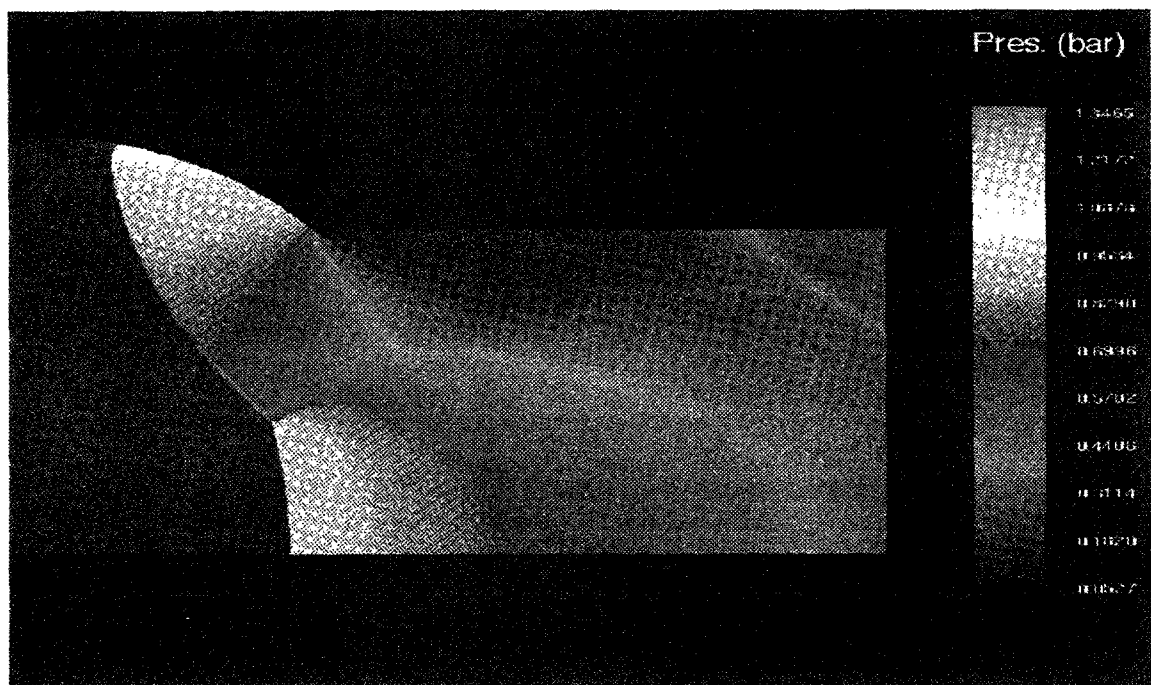


FIG. 3.13 - *Case II : Zoom on temperature around triple point*

FIG. 3.14 - *Case II : Pressure ($10^5 Pa$)*FIG. 3.15 - *Case II : Mach number*

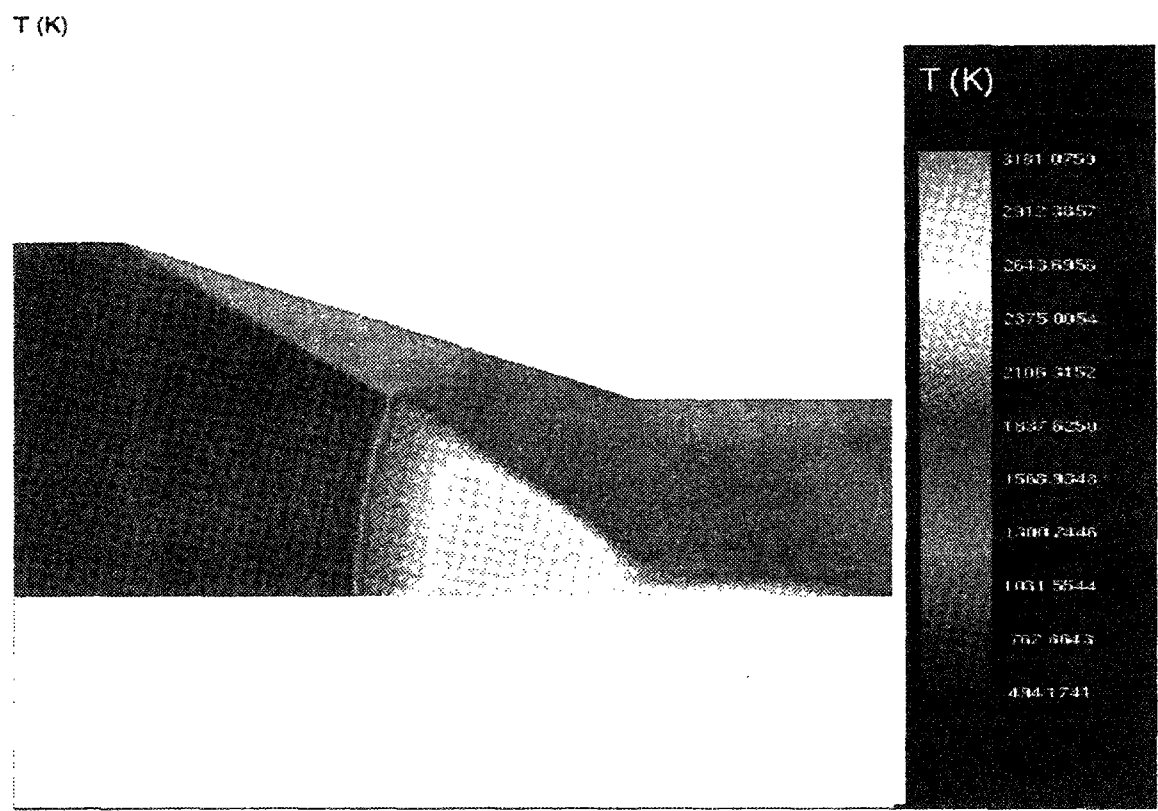


FIG. 3.16 - Case III : Temperature (K) after 29×80 iterations

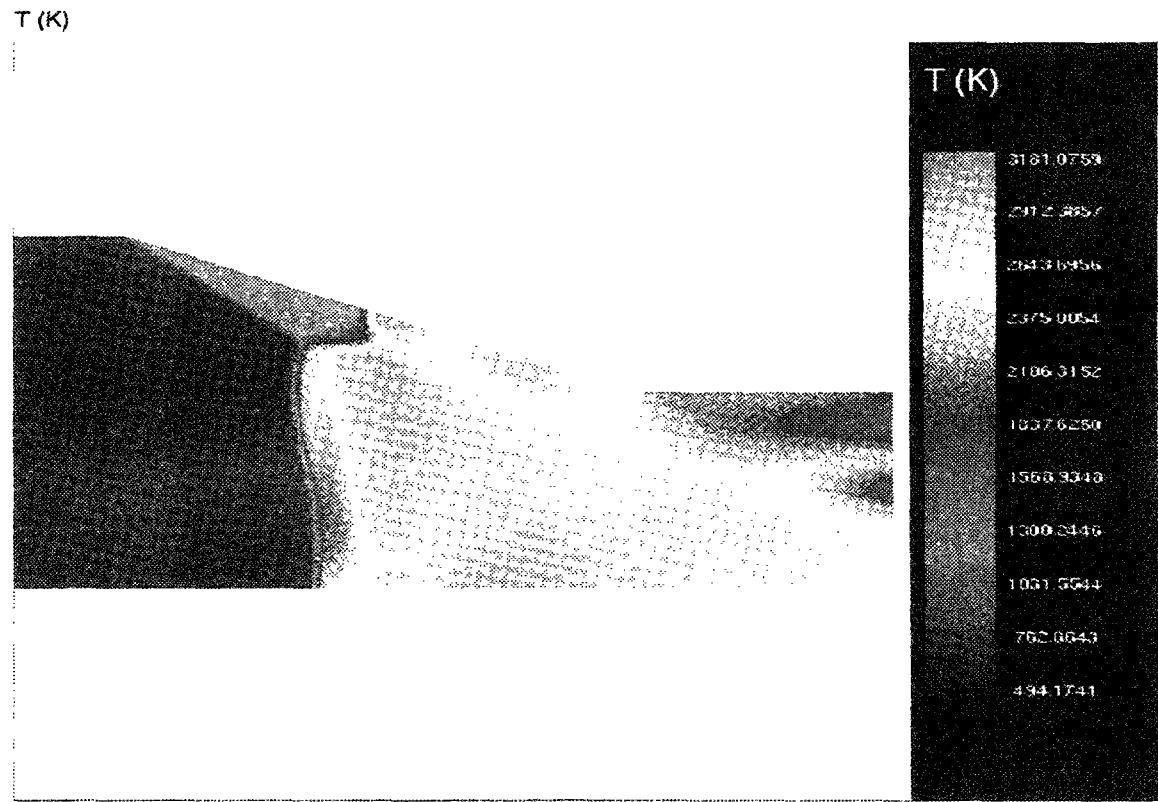


FIG. 3.17 - Case III : Temperature (K) after 40×80 iterations

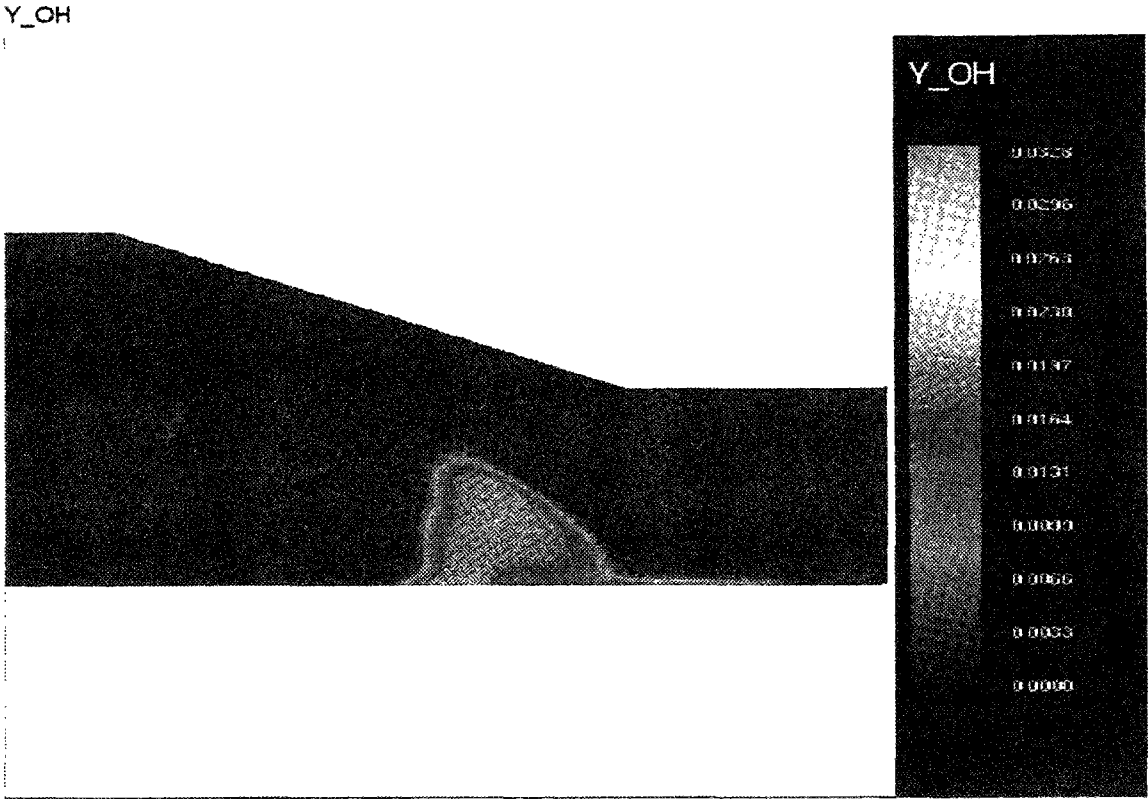


FIG. 3.18 - Case III : OH mass fraction after 29×80 iterations

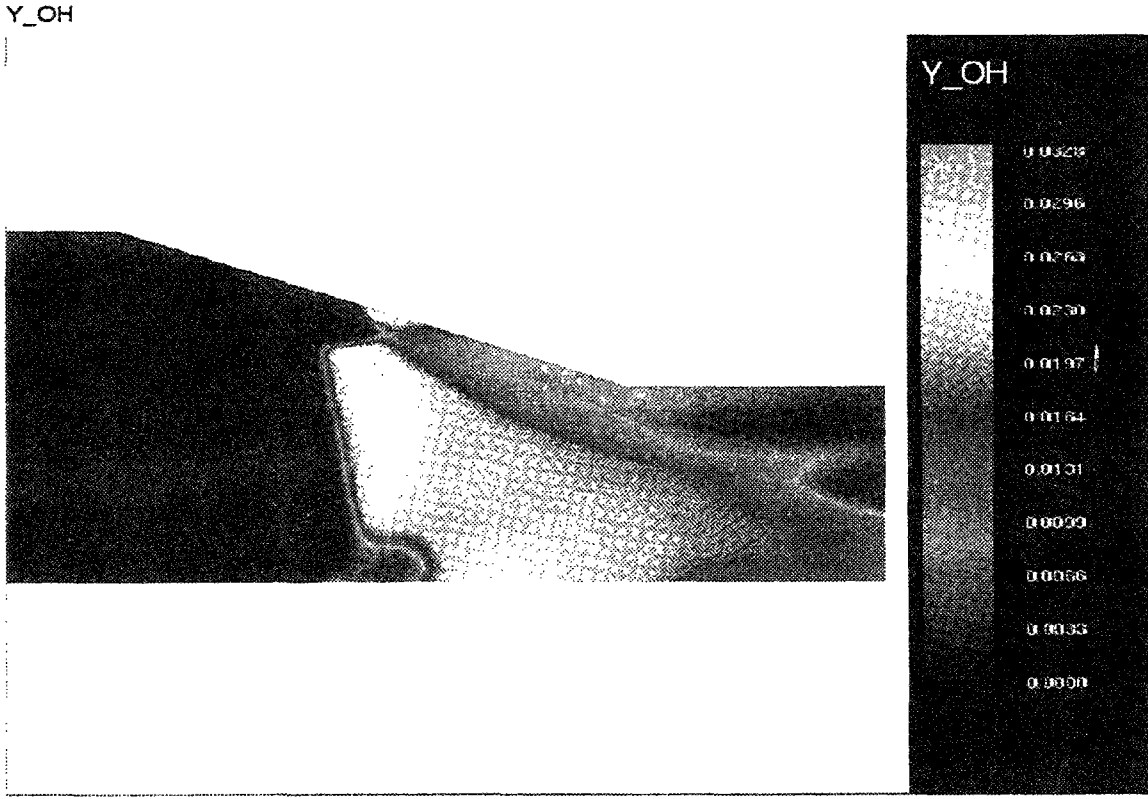
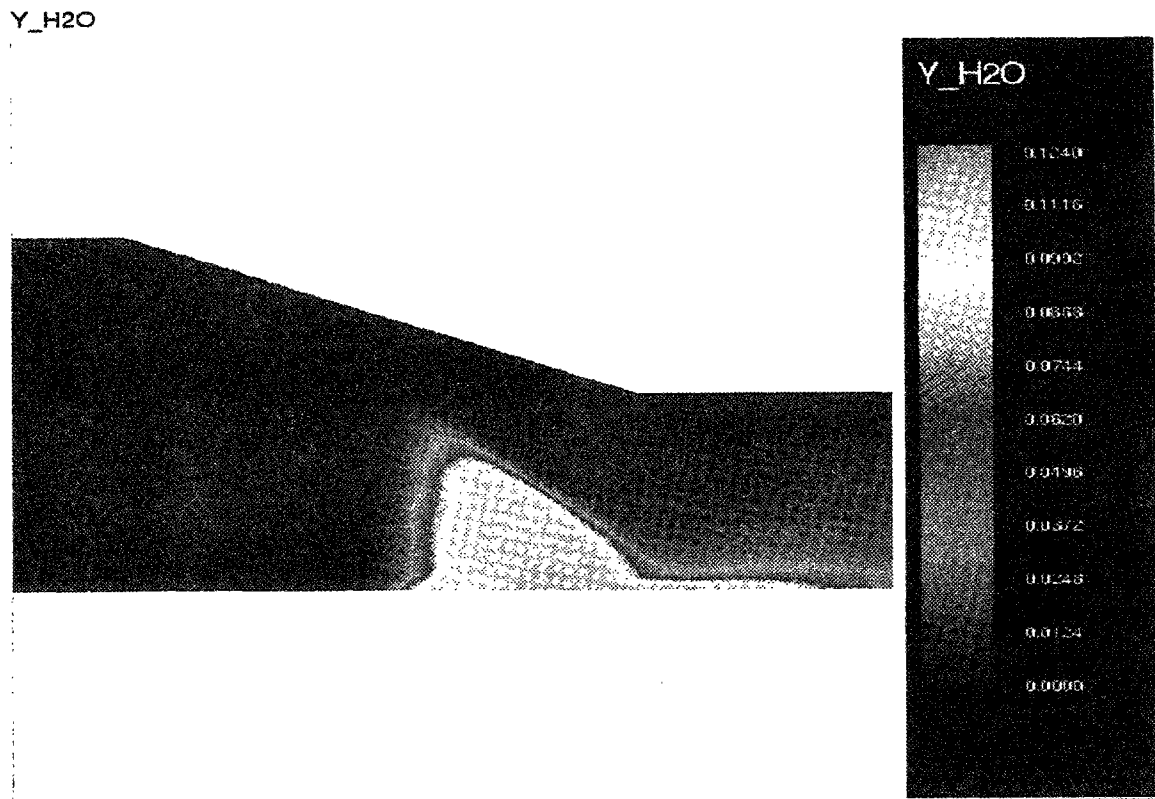
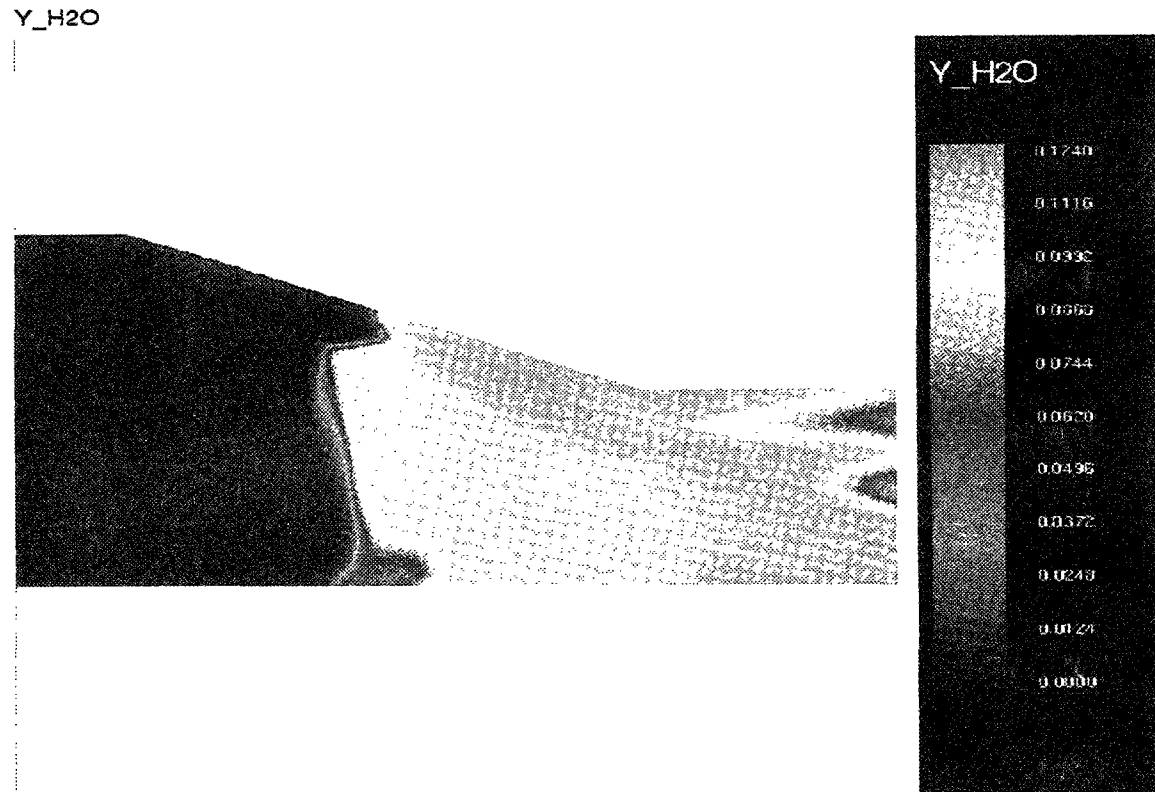
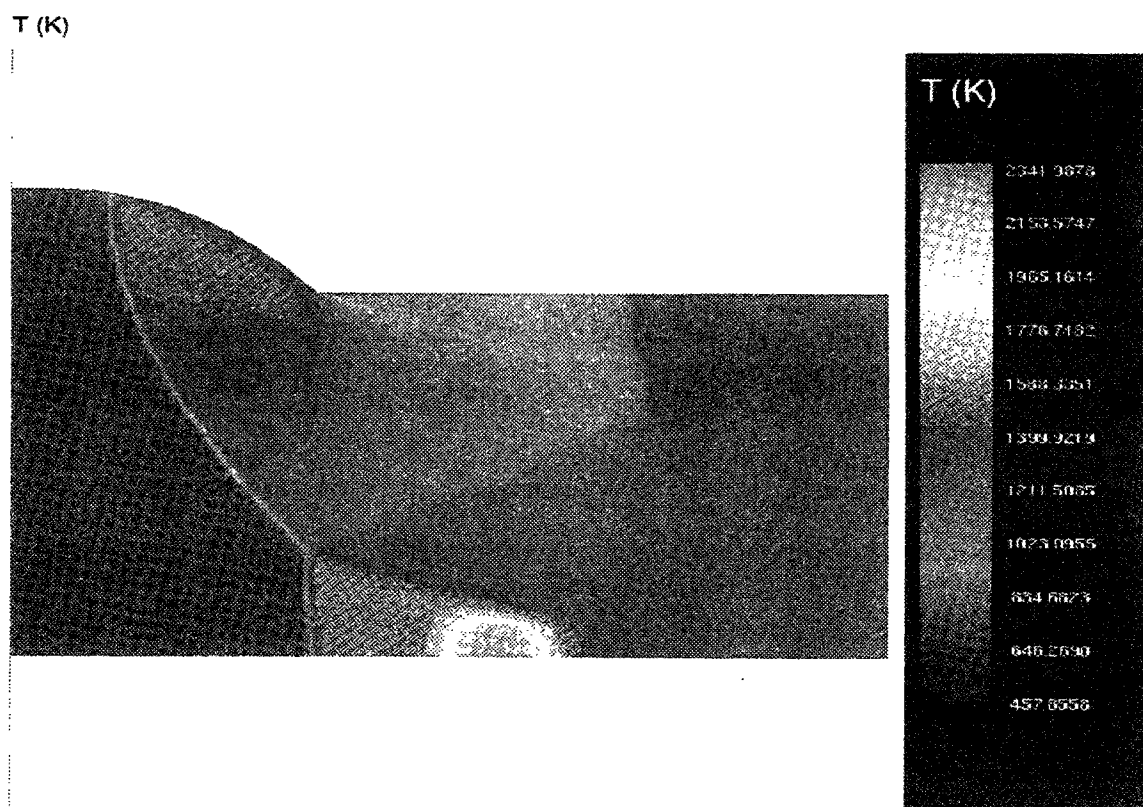
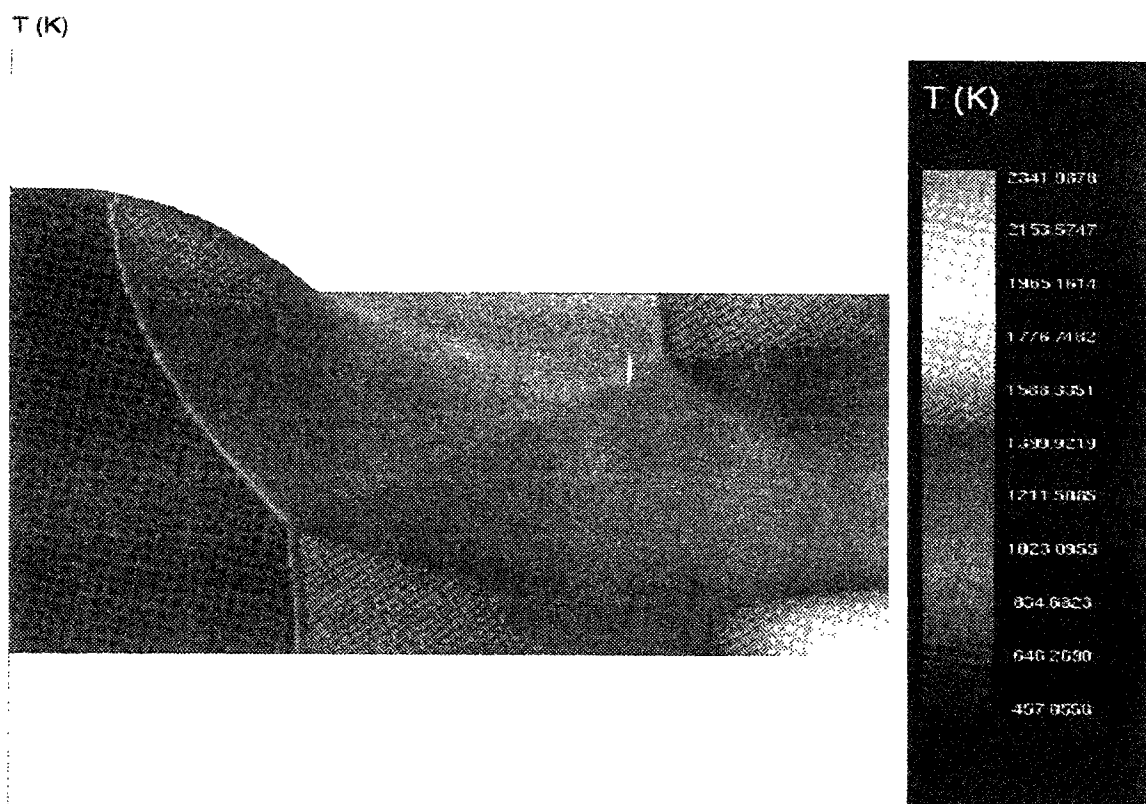
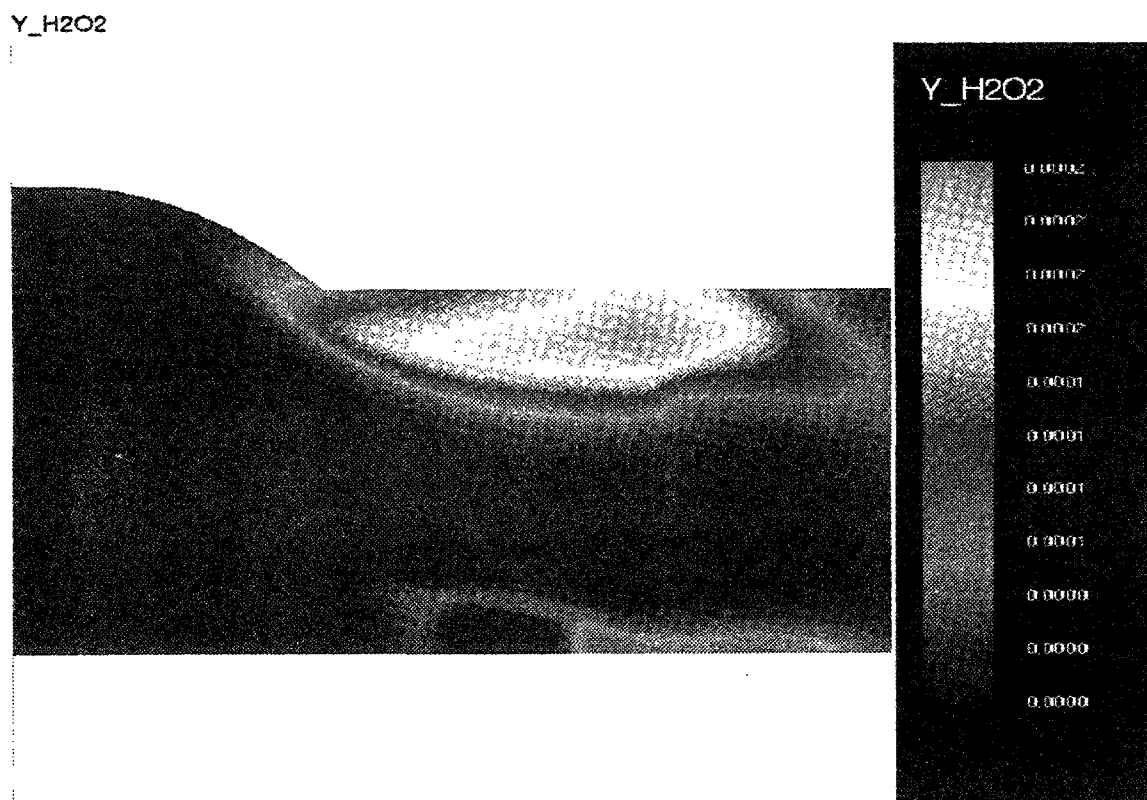
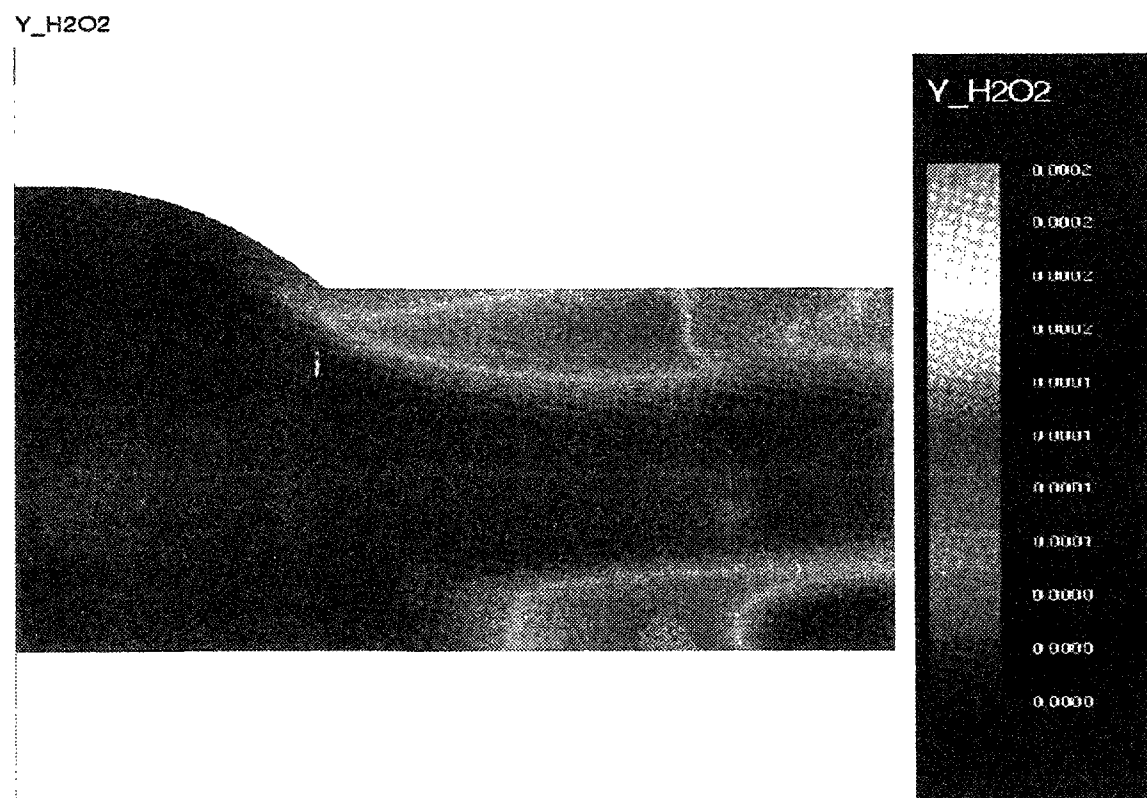
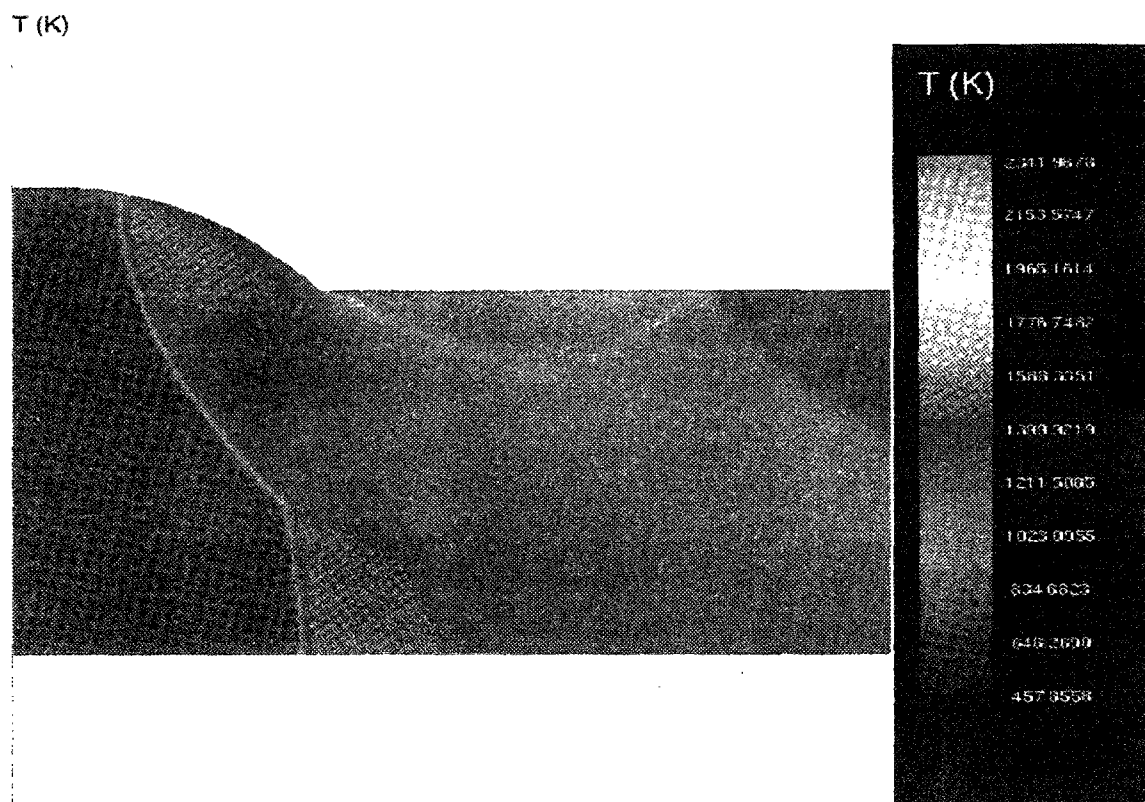
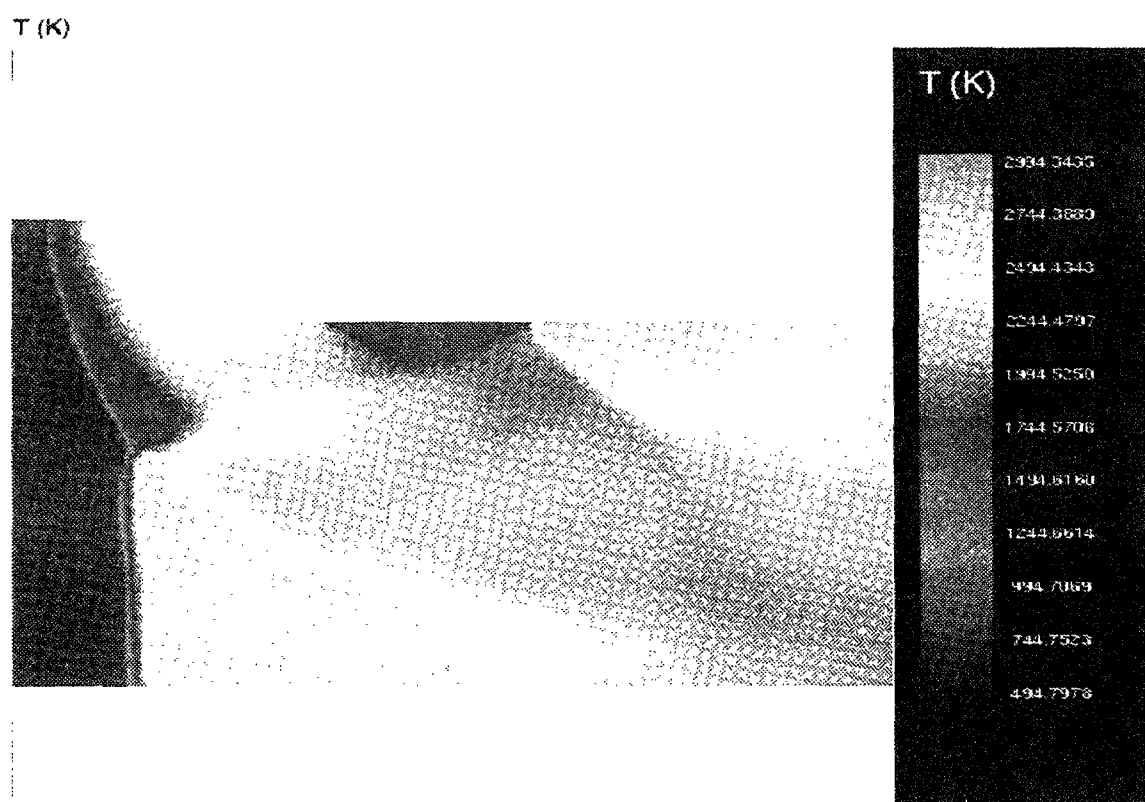


FIG. 3.19 - Case III : OH mass fraction after 40×80 iterations

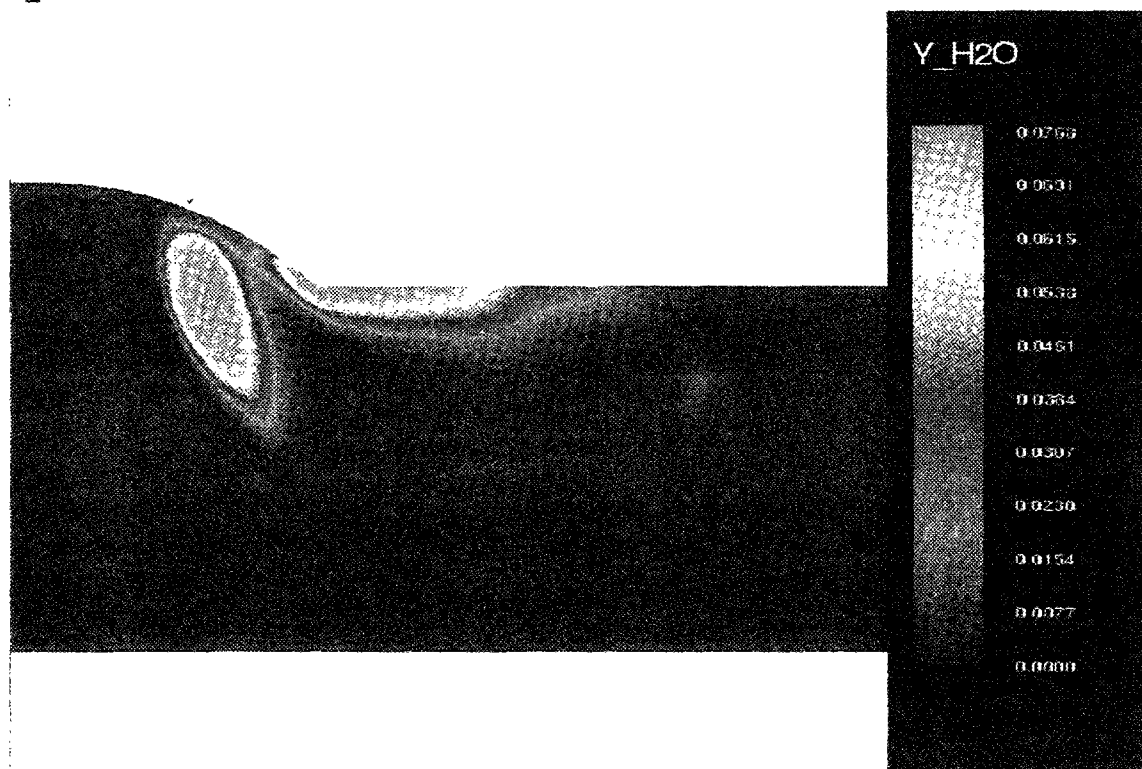
FIG. 3.20 - Case III: H_2O mass fraction after 29×80 iterationsFIG. 3.21 - Case III: H_2O mass fraction after 40×80 iterations

FIG. 3.22 - Case IV.a: Temperature (K) after 15×80 iterationsFIG. 3.23 - Case IV.a: Temperature (K) after 21×80 iterations

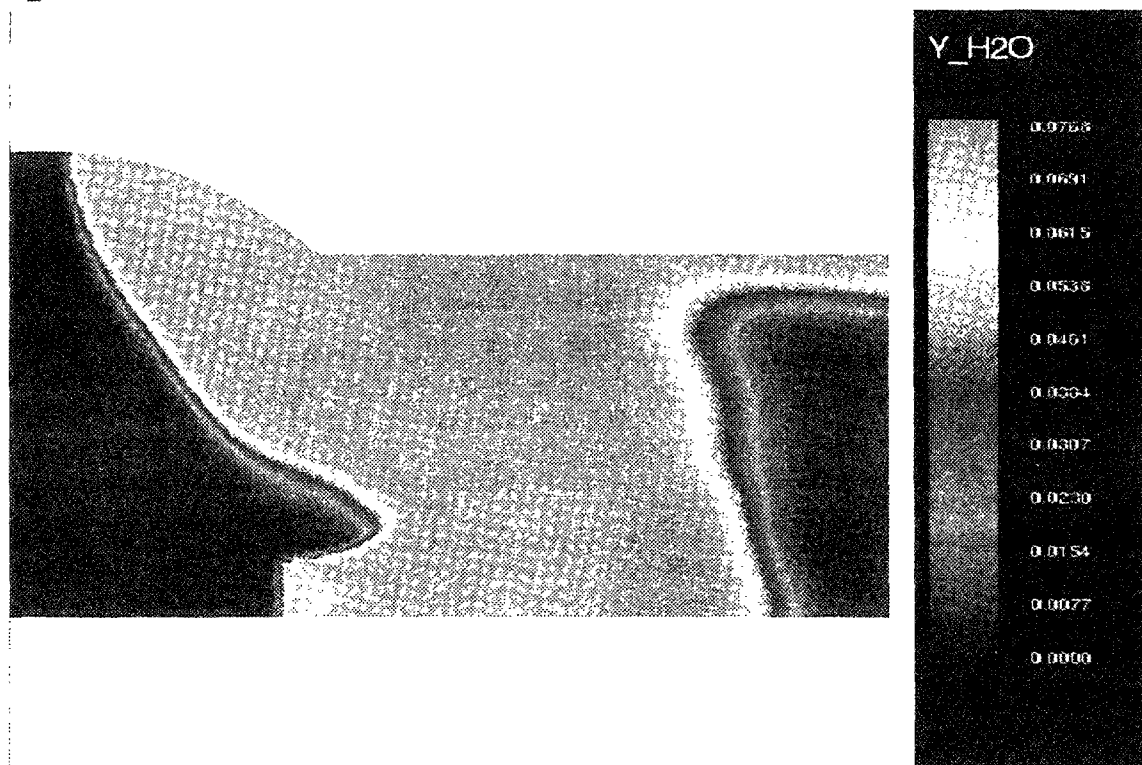
FIG. 3.24 - Case IV.a: H_2O_2 mass fraction after 15×80 iterationsFIG. 3.25 - Case IV.a: H_2O_2 mass fraction after 21×80 iterations

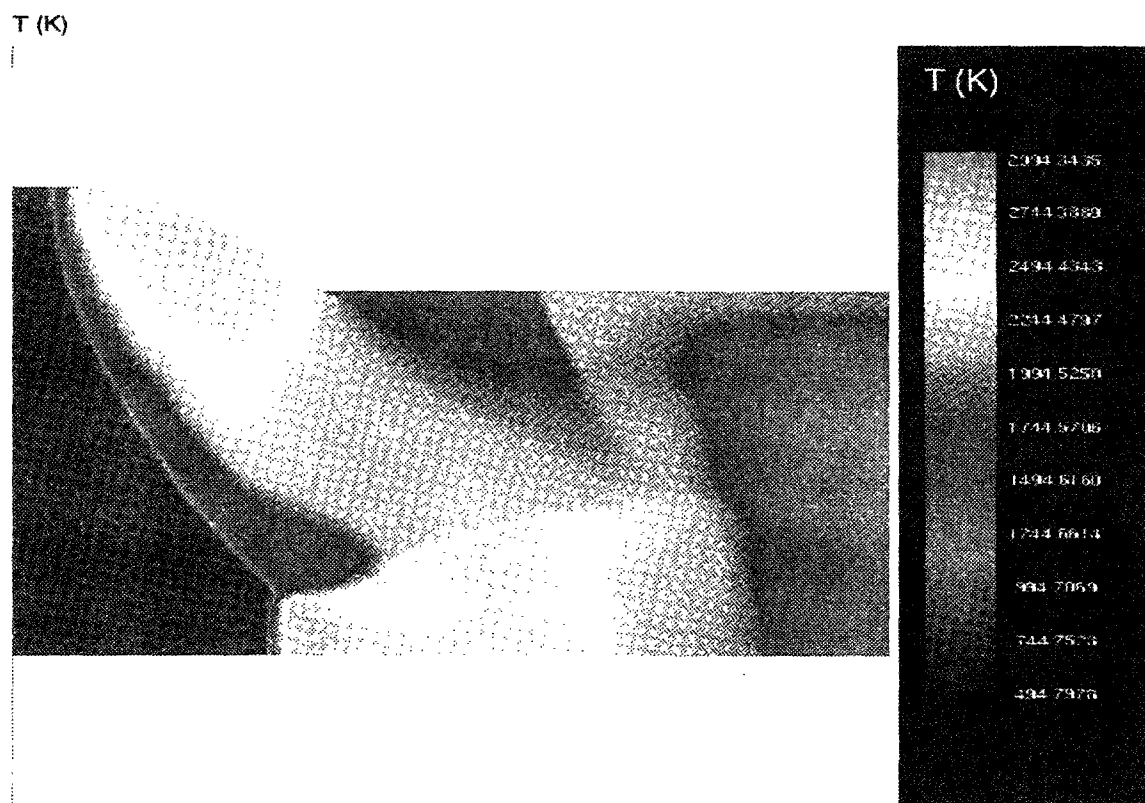
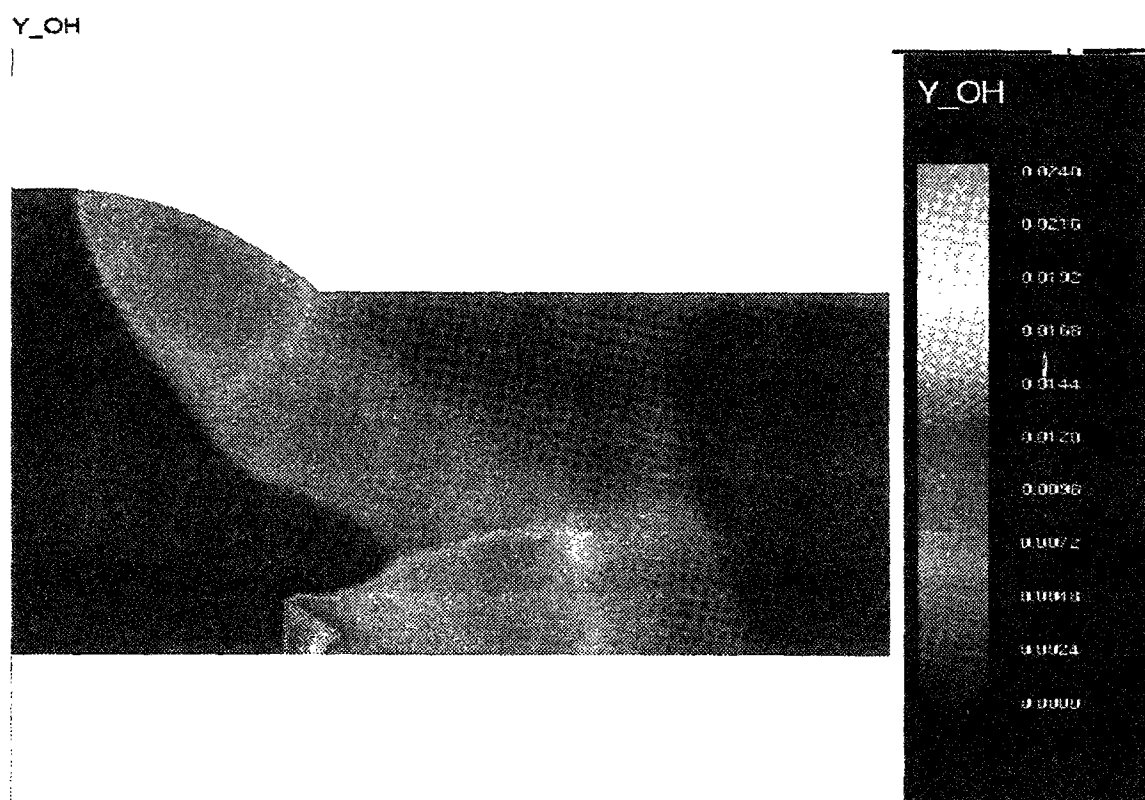
FIG. 3.26 - Case IV.a: Temperature after 46×80 iterations (convergence)FIG. 3.27 - Case IV.b: Temperature after 22×80 iterations

Y_H2O

FIG. 3.28 - Case IV.b: H₂O mass fraction after 6×80 iterations

Y_H2O

FIG. 3.29 - Case IV.b: H₂O mass fraction after 13×80 iterations

FIG. 3.30 - Case IV.b: Temperature after 13×80 iterationsFIG. 3.31 - Case IV.b: OH mass fraction after 13×80 iterations

Bibliographie

- [1] Y. D'ANGELO & B. LARROUTUROU, "Numerical Simulation of Supersonic Combustion with Complex Chemistry", 5th Int. Cong. on Numerical Combustion, Garmish-Partenkirchen, Germany, (1993).
- [2] Y. D'ANGELO, A. ERN & B. LARROUTUROU, "Numerical Simulations of Two-dimensional combustive flows with detailed chemistry", 6th joint EPS-APS Int. Conf. on Phys. Comp., Lugano, Switzerland, (1994).
- [3] B. LARROUTUROU & L. FEZOUI, "On the equations of multi-component perfect or real gas inviscid flow", "Non linear hyperbolic problems", Carasso Charrier Hanouzet & Joly eds., Lecture Notes in Mathematics, **1402**, pp. 69-98, Springer Verlag, Heidelberg, (1989).
- [4] P. L. ROE, "Some contributions to the modelling of discontinuous flows", Proc. AMS/SIAM Seminar, San Diego, (1983).
- [5] H. C. YEE, "Upwind and symmetric shock capturing schemes", NASA Technical memorandum 89464, (1987).
- [6] P. K. SWEEBY, "High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws", *SIAM J. Num. Anal.*, **21**, pp. 995-1011, (1984).
- [7] D.R. STULL & H. PROPHET, "JANAF Thermochemical Tables", 2nd Ed., Washington: NBS NSRDS-NBS37, (1971).
- [8] B. VAN LEER, "Towards the ultimate conservative difference scheme II - Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme", *J. Comp. Phys.*, **14**, pp. 361-370, (1974).
- [9] G. MELHLMAN, "Etude de quelques problèmes liés aux écoulements en déséquilibre chimique et thermique", Thesis, Ecole Polytechnique, Paris, (1991).
- [10] J. A. DESIDERI, N. GLINSKY & E. HETTENA, "Hypersonic reactive flow computation", *Comp. Fluids*, **18**, (2), pp. 151-182, (1990).

- [11] J. A. DESIDERI, N. GLINSKY & L. FEZOU, "Numerical computation of the chemical dissociation and relaxation phenomena behind a detached strong shock", INRIA Report 774, (1987).
- [12] H. STEVE, "Schémas implicites linéarisés décentrés pour la résolution des équations d'Euler en plusieurs dimensions", Thesis, University of Provence Aix-Marseille, (1988).
- [13] P. ARMINJON, A. DERVIEUX, L. FEZOU, B. STOUFFLET & H. STEVE, "Non-Oscillatory Schemes for Multidimensional Euler Calculations with Unstructured Grids", Second Conf. in Hyperbolic Problems, Aachen, (1988).
- [14] S. K. GODUNOV, "A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluid dynamics", *Math. Sbornik*, **47**, pp. 271-306, (1959) (in russian).
- [15] Y. D'ANGELO, "Analyse de l'allumage d'un mélange air-hydrogène à l'aval d'un système stationnaire d'onde de chocs", in preparation.
- [16] M. S. LIOU, B. VAN LEER & J. S. SHUEN, "Splitting of inviscid fluxes for real gases", NASA Technical memorandum 100856, (1988).
- [17] T. P. LIU, "The Riemann problem for general systems of conservation laws", *J. Diff. Equ.*, **18**, pp. 218-34, (1975).
- [18] P. COLLELA & H.M. GLAZ, "Efficient Solution Algorithms for the Riemann Problem for Real Gases", *J. Comp. Phys.*, **59**, pp. 264-89, (1985).
- [19] R.G. SMITH, "The Riemann Problem in Gas Dynamics", *Trans. Am. Math. Soc.*, **249**, pp. 1-50, (1979).
- [20] J.A. SMOLLER, *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer, (1983).
- [21] J.A. MILLER, R.E. MITCHELL, M.D. SMOOKE & R.J. KEE, "Toward a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene: comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments", 19th International Symposium on combustion, The Combustion Institute, pp. 181-96, (1982).
- [22] N. MAMAN, B. LARROUTUROU, "On the use of dynamical finite-element mesh adaptation for 2D simulation of unsteady flame propagation", 12th international conference on numerical methods in fluid dynamics, Morton ed., pp. 534-539, *Lecture Notes in Physics*, **371**, Springer-Verlag, Heidelberg, (1990).
- [23] B. LARROUTUROU, "How to preserve the mass fraction positivity when computing compressible multi-component flows", *J. Comp. Phys.*, **95**, (1), pp. 59-84, (1991).

- [24] A. C. HINDMARSH, "ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers", *IMACS Trans. on Sc. Comp.*, Stepleman et al. eds., pp. 55-64, North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [25] D. CHARGY, private communication.
- [26] R. J. KEE, J. A. MILLER & T. H. JEFFERSON, "CHEMKIN: a general purpose, problem-independent, transportable, FORTRAN chemical kinetics code package", SANDIA Report SAND83-8209, (1983).
- [27] R. ABGRALL, "Preliminary results on the extension of Roe's scheme to a class of real gas mixtures", INRIA Report 987, (1989).
- [28] P. DEUFLHARD, E. HAIRER & J. ZUGCK, "One-step and extrapolation methods for differential-algebraic systems", *Num. Math.*, **51**, pp. 501-516, (1987).
- [29] R. ABGRALL & J. L. MONTAGNE, "Généralisation du schéma d'Osher pour le calcul d'écoulements de mélanges de gaz à concentrations variables et de gaz réels", *La Recherche Aérospatiale*, **4**, pp. 1-13, (1989).
- [30] R. ABGRALL, L. FEZOU, J. TALANDIER, "An Extension of Osher's Riemann Solver for Chemical and Vibrational Non-Equilibrium Gas Flows", INRIA Report 1221, (1990).
- [31] A. HARTEN, P.D. LAX, B. VAN LEER, "On Upstream Differencing and Godunov-type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", *SIAM review*, **25**, pp. 35-61, (1983).
- [32] P. DEUFLHARD, "Recent Progress in Extrapolation Methods for Ordinary Differential Equations", *SIAM review*, **27**, pp. 505-35, (1985).
- [33] S. OSHER, S. CHAKRAVARTHY, "Numerical Experiments with Osher Upwind Scheme for the Euler equations", *AIAA J.*, **21**, (9), (1983).
- [34] S. OSHER, F. SOLOMON, "Upwind Difference Scheme for Hyperbolic Systems of Conservation Laws", *Math. of Comp.*, **38**, (158), pp. 339-74, (1982).
- [35] P.L. ROE, "Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes", *J. Comp. Phys.*, **43**, pp. 357-72, (1981).
- [36] P.L. ROE, "Some Contributions to the Modelling of Discontinuous Flow", *Lectures in Applied Mathematics*, **22**, Engquist, Osher & Sommerville Eds., AMS. pp. 163-93, (1985).
- [37] A. HARTEN, "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Law", *J. Comp. Phys.*, **49**, pp. 357-93, (1983).
- [38] S. KRIZKOV, "First-Order Quasilinear Equations for Several Space Variables", *Math. Sbornik*, **123**, pp. 228-55, (1970).

- [39] F. DUBOIS, G. MEHLMAN, "A Non-parametrized entropy fix for Roe's Method", 10th AIAA CFD Conference, Honolulu, June 1991.
- [40] B. LARROUTUROU & L. FEZOUÏ, "On the equations of multi-component perfect or real gas inviscid flow", Non linear hyperbolic problems, Carasso Charrier Hanouzet & Joly eds., Lecture Notes in Mathematics, **1402**, pp. 69-98, Springer Verlag, Heidelberg, (1989).
- [41] Y. D'ANGELO & B. LARROUTUROU, "Comparison and analysis of some numerical schemes for stiff complex chemistry problems", Math. Mod. Num. Anal., (1994), *to appear* (CERMICS Report 93-21, 1993).
- [42] C. P. LI, "Implicit methods for computing chemically reacting flows", NASA Techn. Mem. 58274, Houston, (1986).
- [43] N. GLINSKY, "Simulation numérique d'écoulements hypersoniques réactifs hors équilibre chimique", Thesis, University of Nice-Sophia-Antipolis, (1990).
- [44] L. R. PETZOLD, "A Description of DASSL: a differential/algebraic system solver", *IMACS Trans. on Sc. Comp.*, Stepleman et al. eds., North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [45] M. D. SMOOKE, A. A. TURNBULL, R. E. MITCHELL & D. E. KEYES, "Solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames by adaptive boundary value methods", *Mathematical modelling in combustion and related topics*, Brauner & Schmidt-Lainé eds., pp. 261-300, NATO ASI Series E, Nijhoff, Doordrecht, (1988).

Deuxième partie

**EFFETS DIFFUSIFS ET
TURBULENTS**

Nous abordons dans cette deuxième partie la modélisation et la résolution numérique des écoulements réactifs en prenant en compte les effets liés à la viscosité du fluide, à la diffusion des espèces chimiques, et à l'interaction entre la combustion et la turbulence.

Nous présentons tout d'abord les méthodes numériques utilisées pour résoudre les équations laminares d'une part et les équations du modèle $k - \epsilon$ d'autre part. Ces méthodes font ensuite l'objet de quelques validations numériques, présentées dans le chapitre 6. Nous abordons pour terminer une première approche pour modéliser la combustion turbulente.

Les travaux présentés dans cette partie ont été effectués dans le service de Méthodes Numériques Avancées de Dassault Aviation, à St-Cloud.

Chapitre 4

Simulation numérique d'écoulements laminaires visqueux réactifs stationnaires

4.1 Introduction

L'introduction des effets de viscosité et de diffusion massique ne modifie pas de façon essentielle l'approche envisagée pour la résolution des équations d'Euler. En l'absence de terme source chimique, les instabilités numériques proviennent pour une large part de la partie hyperbolique convective du système d'équations. L'approche présentée dans ce chapitre est fondée sur une formulation variationnelle classique conduisant à une discrétisation spatiale en volumes finis structurés. Les flux convectifs sont déterminés selon le schéma T.V.D. du deuxième ordre de Harten [7], tandis que les termes diffusifs sont traités de façon centrée usuelle. La convergence vers l'état stationnaire est accélérée par l'utilisation d'un schéma implicite linéarisé. Le terme source chimique fait l'objet d'un traitement spécifique. Lui-même et son Jacobien sont limités de telle sorte que les matrices à inverser lors de l'itération implicite conservent les mêmes propriétés de positivité de leurs valeurs propres qu'en l'absence de combustion. L'introduction des effets liés à la turbulence et à la combustion turbulente fait l'objet des chapitres 5 et 7.

4.2 Système d'équations

Nous précisons dans cette partie le modèle utilisé et en particulier la forme des équations de fermeture constitutives pour les grandeurs thermodynamiques et les coefficients de transport.

Le vecteur des variables conservatives est noté :

$$W = {}^t(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_K, \rho u, \rho v, E) \quad (4.1)$$

où κ est le nombre d'espèces présentes dans le fluide, ρ_k représente la densité partielle en l'espèce k , pour $k = 1, \dots, \kappa$. ρ , u , v sont respectivement la masse volumique totale du fluide et les composantes de la vitesse du fluide. On note Y_k , $k = 1, \dots, \kappa$ les fractions massiques et h_k^F , $k = 1, \dots, \kappa$ les enthalpies massiques de formation des espèces présentes dans le fluide. \mathcal{M}_k désigne la masse molaire de l'espèce k . E est l'énergie volumique totale du fluide, donnée par:

$$E = \rho \left(\frac{1}{2}(u^2 + v^2) + \sum_{n=1}^N Y_n h_n^F + \sum_{n=1}^N Y_n C_{v_n}(T) T \right) \quad (4.2)$$

T est la température, C_{v_k} désigne une "pseudo"-capacité calorifique massique à volume constant de l'espèce k , définie par:

$$C_{v_k}(T) = \frac{\int_0^T c_{v_k}(\theta) d\theta}{T} = \frac{\epsilon_k - h_k^F}{T} \quad (4.3)$$

où ϵ_k et c_{v_k} désignent respectivement l'énergie interne massique et la capacité calorifique massique à volume constant massiques de l'espèce k .

Remarque 1: Anticipant sur la résolution numérique, nous indiquons la façon d'accéder à la température. $C_{v_k}(T)$ est tabulé au préalable, ainsi que $\partial C_{v_k}/\partial T$, à partir par exemple d'expressions polynômiales comme au chapitre 3. Ceci permet alors de déterminer la température T en résolvant (4.2) par une méthode de Newton. Dans la plupart des cas, la convergence des itérations de Newton ne pose pas de difficultés particulières. Quelquefois, surtout dans le cas des écoulements réactifs, ou lorsque l'on fait intervenir la diffusion massique, certaines fractions massiques peuvent devenir provisoirement négatives pendant la résolution de (4.2). On préfère alors définir la température T uniquement à partir des espèces à fraction massique strictement positive. On ne tient ainsi compte dans le calcul de l'énergie E que des Y_k strictement positives. •

4.2.1 Equations de Navier-Stokes bidimensionnelles

En deux dimensions d'espaces x et y , l'écoulement plan du mélange de gaz est régi par le système :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F^V}{\partial x} + \frac{\partial G^V}{\partial y} + S. \quad (4.4)$$

Les flux convectifs F et G , et diffusifs F^V et G^V sont égaux à :

$$F = \begin{pmatrix} \rho_k u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(E + P) \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho_k v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(E + P) \end{pmatrix}, \quad F^V = \begin{pmatrix} J_x^k \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ -Q_{x,x} \end{pmatrix}, \quad G^V = \begin{pmatrix} J_y^k \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ -Q_{y,y} \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

où $\mathbf{J}^k = {}^t(J_x^k, J_y^k)$ est le flux de diffusion de l'espèce k , $\tau = [\tau_{\xi\eta}]$ est le tenseur des contraintes visqueuses, et $\mathbf{Q} = {}^t(Q_x, Q_y)$ désigne le flux d'énergie.

Le terme source S peut être constitué des termes sources de cinétique chimique. Le modèle d'Arrhenius utilisé a déjà été décrit au chapitre 3.

La pression P est donnée par la loi de Dalton :

$$P = \rho RT \sum_{k=1}^{\kappa} \frac{Y_k}{\mathcal{M}_k} \quad (4.6)$$

De façon générale, le tenseur des contraintes visqueuses τ a pour expression :

$$\tau_{\xi\eta} = \lambda v_{\zeta,\zeta} \delta_{\xi\eta} + \mu(v_{\xi,\eta} + v_{\eta,\xi}) \quad (4.7)$$

Dans l'expression (4.7) ci-dessus, les coordonnées x et y ont été indicées ξ , η , ζ . Les notations v_x et v_y correspondent aux notations précédentes u et v . Nous avons adopté ici la convention d'Einstein sur la sommation des indices répétés.

Selon l'hypothèse de Stokes, tenant la viscosité en volume ou "bulk viscosity" $\mu_B := \lambda + \frac{2}{3}\mu$ pour négligeable, les deux coefficients de viscosité du fluide sont reliés par :

$$3\lambda + 2\mu = 0 . \quad (4.8)$$

Si l'on néglige les termes de couplage entre le flux de masse et le flux de chaleur, ce que l'on appelle l'effet Dufour et l'effet Soret, ainsi que les flux radiatifs, alors le flux d'énergie \mathbf{Q} peut s'écrire sous la forme simplifiée :

$$\mathbf{Q} = \mathbf{q} + \tau \mathbf{V} - \sum_{k=1}^{\kappa} \mathbf{J}^k h_k \quad (4.9)$$

où $\mathbf{V} = {}^t(u, v)$. K est la conductivité thermique du mélange de gaz et $\mathbf{q} = -K \nabla T$ désigne le flux de chaleur par conduction thermique. h_k désigne comme au chapitre 3 l'enthalpie massique de l'espèce k :

$$h_k = \epsilon_k + \frac{RT}{\mathcal{M}_k} \quad (4.10)$$

Le premier terme de (4.9) correspond ainsi à la loi de Fourier de conduction de la chaleur, le deuxième aux effets visqueux, le troisième au transport d'énergie par diffusion massique.

On pourra se reporter à [1] ou [2] pour une description plus complète des propriétés de transports dans les écoulements laminaires multi-espèces. Les expressions des coefficients de transports, déduites de la théorie cinétique des gaz, sont complexes et conduisent classiquement à des systèmes linéaires coûteux à résoudre. Même si certains auteurs ont proposé des expressions simplifiées ou interpolées [3, 4, 5], leur obtention est souvent onéreuse en temps de calcul. Dans l'optique de la simulation d'écoulements turbulents, on se contentera d'une modélisation simplifiée pour ces coefficients de transports laminaires. En effet, dans l'approche considérée au chapitre 5, les effets de transport par la turbulence sont prépondérants au sein de l'écoulement moyen. Toute modélisation trop fine est ainsi superflue au niveau de précision considéré, et plutôt réservée à l'approche par simulation directe.

Les termes de diffusion massiques sont alors simplement pris en compte par un processus fickien :

$$\mathbf{J}^k = \rho D \nabla Y_k \quad (4.11)$$

et les coefficients de transports K et D sont donnés par

$$K = \frac{c_p \mu}{\text{Pr}} \quad (4.12)$$

et

$$\rho D = \frac{\mu}{\text{Sch}} \quad (4.13)$$

où la capacité calorifique massique moyenne à pression constante, c_p , sera déterminée par la loi de Mayer :

$$c_p = \sum_{k=1}^{\kappa} Y_k \left(c_{v_k} + \frac{R}{\mathcal{M}_k} \right), \quad (4.14)$$

$c_{v_k} = \frac{\partial \epsilon_k}{\partial T}$ est également tabulé et stocké au préalable pour chaque composant. Pr et Sch désignent respectivement les nombres de Prandtl et de Schmidt. Il seront pris égaux à 0.7 en écoulements laminaires. Nous reviendrons sur ces expressions dans le cas turbulent.

Ainsi cette modélisation simplifiée permet d'évaluer tous les coefficients de transport par la seule donnée de μ . Encore une fois, une tabulation préalable est effectuée pour accéder aux valeurs de μ . Ce coefficient est approché par la formule semi-empirique de Wilke [6], donnant le coefficient de viscosité d'un mélange de gaz, en fonction de la viscosité μ_k de chaque constituant k :

$$\mu_{\text{mélange}} = \frac{\sum_{k=1}^{\kappa} X_k \mu_k(T)}{\sum_{l=1}^{\kappa} X_l \Psi_{kl}} \quad (4.15)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k et

$$\Psi_{kl} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{\mathcal{M}_k}{\mathcal{M}_l} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_k}{\mu_l}} \left(\frac{\mathcal{M}_k}{\mathcal{M}_l} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2. \quad (4.16)$$

Les valeurs des $\mu_k(T)$ sont tabulées avant le début du calcul et interpolées linéairement en fonction de la température au cours des itérations. Les expressions théoriques de ces coefficients font classiquement intervenir des intégrales de collision réduites $\Omega^*(2, 2)$, qui dépendent du modèle utilisé de potentiel d'interaction entre les particules [1] [2]. Il est toutefois plus simple d'utiliser des polynômes d'approximation en T de la forme :

$$\log(\mu_k) = b_{1k} + b_{2k} \log T + b_{3k} (\log T)^2 + b_{4k} (\log T)^3 \quad (4.17)$$

et qui peuvent être trouvés dans [5].

L'intérêt de cette tabulation préalable est bien sûr de pouvoir choisir un modèle arbitrairement complexe sans subir d'influence directe sur le temps de calcul pour l'écoulement.

4.2.2 Géométrie axisymétrique

Un écoulement tridimensionnel présentant une symétrie de révolution autour d'un axe peut être réduit à un système bidimensionnel. Il intervient alors des termes supplémentaires par rapport aux équations planes, provenant de la forme cylindrique des équations (4.4).

Notons (r, θ, z) les coordonnées cylindriques associées au repère cartésien du paragraphe précédent. On suppose classiquement que l'écoulement n'a pas de composante de vitesse en dehors du plan $r - z$, c'est à dire que la composante v_θ de la vitesse est nulle. Ceci permet une description à deux composantes spatiales pour l'écoulement.

Le nouveau système d'équations peut se mettre sous une forme identique au système (4.4), avec $r \equiv y$ et $z \equiv x$ à condition d'ajouter un terme supplémentaire S_{axi} que l'on peut formellement inclure au vecteur des termes sources S . Ce terme additionnel peut se décomposer en terme Euler et terme diffusif selon :

$$S_{\text{axi}} = S_{\text{axi}}^{\text{eul}} + S_{\text{axi}}^{\text{visc}}, \quad (4.18)$$

où

$$S_{\text{axi}}^{\text{eul}} = -\frac{u_r}{r} \begin{pmatrix} \rho Y_k \\ \rho u_z \\ \rho u_r \\ E + P \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

et

$$S_{\text{axi}}^{\text{visc}} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} J_r^k \\ \tau_{rz} + \lambda u_{r,z} + u_r \lambda_{,z} \\ \tau_{rr} - (\lambda + 2\mu) \frac{u_r}{r} - \lambda u_{z,z} + u_r \lambda_{,r} \\ \tau_{rz} u_z + \tau_{rr} u_r + \lambda u_r (2u_{r,r} + u_{z,z}) + \lambda u_z u_{r,z} + u_r u_z \lambda_{,z} + u_r^2 \lambda_{,r} - q_r \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

avec $q_r = -KT_{,r}$.

4.3 Formulation volumes finis structurés et schéma T.V.D.

Le principe de la formulation volumes finis a été présenté dans le cas de cellules déduites de la triangulation du domaine de calcul, dans le cas non-structuré (cf. chapitre 3). Ici, le domaine de calcul est divisé en cellules quadrangulaires, a priori de formes quelconques. La seule contrainte est que le maillage soit structuré, c'est-à-dire qu'il puisse se déduire par déformation conforme d'un maillage carré.

4.3.1 Discrétisation spatiale et approximation temporelle

La partie convective des équations de Navier-Stokes est intégrée sur une cellule \mathcal{C} , de bord $\partial\mathcal{C}$, selon :

$$\int_{\mathcal{C}} W_{,t} d\mathcal{C} + \int_{\partial\mathcal{C}} (FN_x + GN_y) d\sigma = 0 \quad (4.21)$$

N_x et N_y sont les coordonnées du vecteur normal à C . Dans un maillage structuré, la cellule C est déterminée par sa position en i et j . Elle sera donc notée $C_{i,j}$. Le schéma explicite du premier ordre en temps correspondant à (4.21) peut alors s'écrire comme au chapitre 3 :

$$\frac{W_{i,j}^{n+1} - W_{i,j}^n}{\Delta t_{i,j}^n} + \frac{1}{\text{Aire}(C_{i,j})} \int_{\partial C_{i,j}} (FN_x + GN_y) d\sigma = 0 \quad (4.22)$$

où n désigne l'avancement en temps et $\Delta t_{i,j}^n$ le pas de temps variable et local. Désignons respectivement par $\vec{I}_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\vec{J}_{i,j+\frac{1}{2}}$ les vecteurs normaux aux interfaces entre les cellules $C_{i,j}$ et $C_{i+1,j}$ (notée $\mathcal{I}_{i+\frac{1}{2},j}$) d'une part et entre les cellules $C_{i,j}$ et $C_{i,j+1}$ (notée $\mathcal{I}_{i,j+\frac{1}{2}}$) d'autre part, et orientés vers les x et les y croissants. $\Delta\sigma_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\Delta\sigma_{i,j+\frac{1}{2}}$ désignent les longueurs des interfaces $\mathcal{I}_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\mathcal{I}_{i,j+\frac{1}{2}}$. L'intégrale du flux sur C s'écrit alors :

$$\vec{\phi}_{i+\frac{1}{2},j} \vec{I}_{i+\frac{1}{2},j} \Delta\sigma_{i+\frac{1}{2},j} + \vec{\phi}_{i,j+\frac{1}{2}} \vec{J}_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta\sigma_{i,j+\frac{1}{2}} + \text{autres termes} \quad (4.23)$$

où $\vec{\phi} = {}^t(\phi_x, \phi_y)$ est le vecteur des flux numériques, dont l'expression pour la direction x est donnée plus bas; $\Delta\sigma_{i+\frac{1}{2},j}$ désigne la longueur de l'interface $\mathcal{I}_{i+\frac{1}{2},j}$. Les "autres termes" désignent les termes similaires pour les interfaces $\mathcal{I}_{i-\frac{1}{2},j}$ et $\mathcal{I}_{i,j-\frac{1}{2}}$. Cette approche nous permet de décomposer la résolution en deux étapes monodimensionnelles, et ainsi d'utiliser comme au chapitre 3 un solveur de Riemann. La solution au temps $n+1$ est alors obtenue après l'application sur la solution au temps n de deux opérateurs L_i^n et L_j^n , agissant dans les directions i puis j de façon décorrélée. La variation totale pour le vecteur des variables conservatives peut alors s'écrire comme une somme de deux termes :

$$W^{n+1} = W^n + \Delta_i W^n + \Delta_j W^n \quad (4.24)$$

Chacunes des contributions $\Delta_\xi W^n$ correspond à l'application de l'opérateur L_ξ à W^n .

4.3.2 Schéma T.V.D.

Le schéma T.V.D. ("à variation totale décroissante") du deuxième ordre utilisé pour déterminer les flux numériques convectifs est dû à Harten [7]. Au premier ordre, il se ramène identiquement au schéma de Roe. Ce schéma – non-MUSCL – atteint le deuxième ordre en espace par l'introduction d'une antidiffusion.

Pour par exemple la direction i , le flux numérique explicite se décompose en un flux centré aux interfaces et en un terme diffusif :

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} (F(W_{i,j}) + F(W_{i+1,j})) + \phi_{i+\frac{1}{2},j}^D \quad (4.25)$$

Le flux diffusif $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^D$ est déterminé sur les variables caractéristiques – celles qui diagonalisent le système hyperbolique – notées ψ , et dont les expressions sont données dans la section 3.9.4.

Si $\alpha_{i+\frac{1}{2},j} = \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}$, la m -ième composante de $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^D$ s'écrit :

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{D,m} = \frac{1}{2} \mathcal{V}(\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^m) (g_{i,j}^m + g_{i+1,j}^m) - \mathcal{V} \left(\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^m + \omega_{i+\frac{1}{2},j}^m \right) \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^m \quad (4.26)$$

avec

$$\omega_{i+\frac{1}{2},j}^m = \frac{1}{2} \mathcal{V}(\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^m) \begin{cases} \frac{g_{i+1,j}^m - g_{i,j}^m}{\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^m} & \text{si } \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^m \neq 0 \\ 0 & \text{si } \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^m = 0 \end{cases} \quad (4.27)$$

où \mathcal{V} est une fonction parabolique de correction entropique, due à Harten. Son expression a déjà été donnée dans le chapitre 3 :

$$\mathcal{V}(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{\lambda^2 + \delta^2}{\delta} \right] & \text{si } |\lambda| < \delta \\ |\lambda| & \text{si } |\lambda| \geq \delta \end{cases} \quad (4.28)$$

avec par exemple pour la direction x , $\delta = \epsilon \Delta x_{i,j} / \Delta t_{i,j}^n$, $\Delta x_{i,j} / \Delta t_{i,j}^n$ désignant le rapport local du pas d'espace en x sur le pas de temps, et ϵ un paramètre strictement positif et inférieur à un.

Cette fonction empêche la valeur propre de s'annuler, en effectuant un lissage parabolique au voisinage de l'origine. Le choix du paramètre ϵ sera soumis à deux contraintes : ne pas affecter la précision du schéma tout en préservant sa robustesse. Sa valeur n'est a priori pas fixée tout au long du déroulement des itérations. En outre, il pourra dépendre de la nature – linéairement dégénérée ou vraiment non linéaire – du champ auquel la correction s'applique. En anticipant sur le schéma implicite de la partie 4.4, la valeur de ϵ peut également varier selon que la correction s'appliquera à la partie explicite ou implicite de l'opérateur. Enfin, il ne sera a priori pas identique pour les deux directions i ou j . Toutes ces possibilités ouvertes au choix de ϵ seraient idéalement à moduler suivant le cas de calcul.

4.3.3 Limiteurs de flux

Les termes $g_{i,j}^m$ sont des limiteurs de flux correspondant aux termes d'antidiffusion. Ils sont définis ici selon :

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^m &= \frac{1}{2} \left[\mathcal{V}(\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^m) - \frac{\Delta x_{i,j}}{\Delta t_{i,j}} (\mu_{i+\frac{1}{2},j}^m)^2 \right] \alpha_{i+\frac{1}{2},j}^m \\ g_{i,j}^m &= \sigma_{i+\frac{1}{2},j}^m \text{Max} \left[0, \text{Min}(|\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^m|, \tilde{g}_{i-\frac{1}{2},j}^m \sigma_{i+\frac{1}{2},j}^m) \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

avec $\sigma_{i+\frac{1}{2},j}^m = \text{sign}(\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^m)$, et $\mu_{i+\frac{1}{2},j}^m = \frac{\Delta x_{i,j}}{\Delta t_{i,j}} \lambda_{i+\frac{1}{2},j}^m$.

En l'absence de limiteurs $\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^m$, on retrouve le schéma de Roe du premier ordre. On pourra se reporter à [8, 9, 10] pour une revue de tels schémas, ou pour d'autres expressions proposées pour les $\tilde{g}_{i+\frac{1}{2},j}^m$.

Remarque 2 : La discrétisation des autres termes de flux – visqueux et de diffusion – des équations s'effectue de façon centrée usuelle. Le traitement du terme source chimique sera abordé dans la section 4.5. •

4.3.4 Conditions aux limites

Dans la formulation volumes finis précédemment décrite, on tient compte numériquement des conditions aux limites par l'introduction de cellules miroir, symétriques des cellules du bord du domaine discret primaire. La frontière Υ du nouveau domaine de calcul, constitué du domaine discret primaire et des cellules miroir, peut alors se décomposer en quatre parties, comme indiqué ci-dessous.

- 1) Une partie où les conditions sont forcées à chaque itération : il s'agit de l'entrée d'air, de l'injection, de conditions à l'infini pour un écoulement externe...
- 2) Une partie où les variables liées aux cellules miroir sont extrapolées à l'ordre 0 à partir des valeurs des cellules internes adjacentes : il s'agit essentiellement des sorties supersoniques.
- 3) Une partie correspondant à une sortie subsonique; on suppose que la pression "à l'infini" P_{sortie} en sortie est connue et l'on évalue les variables conservatives aux cellules miroirs par une méthode des caractéristiques.
- 4) Une partie correspondant aux murs; les conditions peuvent être alors mur glissant ou non-glissant, adiabatique ou isotherme. La condition de glissement conduit à l'intégrale de pression classique (cf. chapitre 3). La condition de non-glissement (vitesse nulle à la paroi) conduit à imposer sur les cellules miroirs une vitesse opposée à celle de la cellule intérieure, ce qui conduit bien à une vitesse nulle sur l'interface cellule intérieure-cellule miroir. Pour une paroi adiabatique, la condition flux de chaleur nul impose que la température de la cellule miroir est égale à celle de la cellule intérieure. Pour une paroi isotherme, de température imposée T_{paroi} , la température pour la cellule miroir sera égale à $2 T_{\text{paroi}} - T_{\text{intérieur}}$ de telle sorte que la température évaluée à l'interface soit égale à T_{paroi} .

Remarque 3 : Lorsque l'on impose une condition de non-glissement, l'évaluation des flux numériques convectifs entre la cellule intérieure et la cellule miroir – de vitesses opposées – introduit, du fait même de la nature monotone du schéma, une viscosité artificielle qui se rajoute à la viscosité physique. Lorsque les effets visqueux sont prépondérants, c'est-à-dire précisément près des parois, on introduit alors une couche limite numérique artificielle. Pour minimiser cette dernière, on effectue alors un traitement particulier pour le calcul des flux aux parois. Celui-ci [13] permet d'éviter pour la partie convective la résolution d'un problème de cisaillement avec viscosité numérique. •

4.4 Schéma implicite linéarisé

4.4.1 Limitation du pas de temps

L'efficacité informatique du schéma explicite précédent peut dans certains cas être fortement amoindrie par le critère de stabilité de tels schémas. Si on fait l'approximation de découpler chacun des termes liés à la convection ou aux divers phénomènes de diffusion, on peut écrire une condition nécessaire approchée de stabilité sous la forme :

$$\Delta t < \text{Min}(\tau_{\text{conv}}, \tau_{\text{diff}}) \quad (4.30)$$

si l'on ne tient pas compte de la chimie. En une dimension d'espace, à l'aide d'une analyse de Fourier, on peut expliciter ces limites de stabilité liées à chacun des termes de convection et de diffusion de quantité de mouvement, de chaleur ou de masse. Si u et c désignent la vitesse du fluide et la vitesse du son locales, D^{max} le maximum des coefficients de diffusion, $D^{\text{max}} = \text{Max}(K/c_p, D, \mu)$, et ρ la masse volumique locale, il vient :

$$\tau_{\text{conv}} = \frac{\Delta x}{|u| + c}, \quad 2\tau_{\text{diff}} = \frac{\rho \Delta x^2}{D^{\text{max}}}. \quad (4.31)$$

L'obtention d'une solution peut alors parfois nécessiter un nombre excessivement coûteux d'itérations.

Pour pouvoir augmenter le pas de temps sans affecter la stabilité, le schéma explicite peut alors être linéairement implicité. L'implicitation des termes convectifs et visqueux est entamée dans [11, 12, 13]. L'implicitation des termes axisymétriques ou de diffusion s'effectue de façon semblable.

4.4.2 Principe de l'implicitation

Réécrivons le schéma explicite global sous la forme :

$$\Delta^n W_{i,j} = \Phi(W_{i,j}^n, W_{i+1,j}^n, W_{i-1,j}^n, W_{i,j+1}^n, W_{i,j-1}^n) \quad (4.32)$$

où Φ désigne le flux numérique total, dépendant des valeurs des variables aux cellules entourant la cellule $C_{i,j}$, et $\Delta^n = .^n - .^{n-1}$. La version totalement implicite non linéarisée de ce schéma pourrait s'écrire $\Delta^n W_{i,j} = \Phi(W_{i,j}^{n+1}, W_{i+1,j}^{n+1}, W_{i-1,j}^{n+1}, W_{i,j+1}^{n+1}, W_{i,j-1}^{n+1})$. Cependant, la détermination de la solution exacte d'un tel système serait non seulement onéreuse, mais pourrait également introduire d'autres problèmes de stabilité, liés aux méthodes numériques de résolution, comme la méthode de Newton [15].

L'approche linéarisée peut être vue comme la linéarisation par un développement de Taylor du schéma précédent, ou bien encore, de façon équivalente, comme l'approximation de la solution du système non linéaire après une seule itération de la méthode de Newton. Le

schéma implicite s'écrit selon :

$$\Delta^n W_{i,j} = \Phi^n + \sum_{k=1}^5 [\Phi, k]^n \Delta^n X_k \quad (4.33)$$

avec $(X_1, \dots, X_5) = (W_{i,j}, W_{i-1,j}, W_{i+1,j}, W_{i,j-1}, W_{i,j+1})$. Si l'on note ces matrices jacobiennes Φ, k respectivement A, B, C, D et E pour $k = 1, \dots, 5$, une itération implicite consiste à inverser le système linéaire

$$\begin{aligned} \frac{\Delta^n W_{i,j}}{\Delta t} &+ A_{i,j}^n \Delta^n W_{i,j} + D_{i,j}^n \Delta^n W_{i,j+1} + E_{i,j}^n \Delta^n W_{i,j-1} \\ &+ B_{i,j}^n \Delta^n W_{i-1,j} + C_{i,j}^n \Delta^n W_{i+1,j} \\ &= \Phi^n \end{aligned} \quad (4.34)$$

Le système précédent est résolu à l'aide d'une méthode de relaxation par ligne introduite dans [14]. L'algorithme peut se décomposer comme suit :

– on commence par prendre

$$\Delta W_{i,j}^0 = 0 \quad (4.35)$$

– puis on itère les deux résolutions suivantes sur l'indice $k \geq 1$ (N_i désigne le nombre de cellules dans la direction x):

– dans une première étape, on résout pour $i = N_i$ à 1 (on omet l'indice n)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta W_{i,j}^{2k-1}}{\Delta t} &+ A_{i,j} \Delta W_{i,j}^{2k-1} + D_{i,j} \Delta W_{i,j+1}^{2k-1} + E_{i,j} \Delta W_{i,j-1}^{2k-1} \\ &+ B_{i,j} \Delta W_{i-1,j}^{2k-2} + C_{i,j} \Delta W_{i+1,j}^{2k-1} \\ &= \Phi_{i,j} \end{aligned} \quad (4.36)$$

– puis on résout pour $i = 1$ à N_i

$$\begin{aligned} \frac{\Delta W_{i,j}^{2k}}{\Delta t} &+ A_{i,j} \Delta W_{i,j}^{2k} + D_{i,j} \Delta W_{i,j+1}^{2k} + E_{i,j} \Delta W_{i,j-1}^{2k} \\ &+ B_{i,j} \Delta W_{i-1,j}^{2k} + C_{i,j} \Delta W_{i+1,j}^{2k-1} \\ &= \Phi_{i,j} \end{aligned} \quad (4.37)$$

En pratique, il n'est nécessaire d'effectuer qu'une ou deux itérations de relaxation pour converger vers la solution du système linéaire (4.34), lorsque les termes convectifs sont prépondérants. Mis à part le cas des couches limites, où les effets visqueux sont déterminants, la caractéristique précédente sera en général vérifiée pour les essais numériques envisagés.

Remarque 4 : Le flux numérique total Φ pour la cellule $C_{i,j}$ n'est en toute rigueur pas uniquement fonction des cinq cellules $C_{i,j}, C_{i+1,j}, C_{i-1,j}, C_{i,j+1}, C_{i,j-1}$, puisqu'interviennent des grandeurs faisant intervenir les cellules diagonales du type $C_{i+1,j+1}$ dans les termes visqueux et diffusifs. Pour ces flux, et pour conserver la structure du code implicite pour les équations

d'Euler, nous n'avons donc réalisé qu'une implicitation partielle. Mais les termes omis sont en fait négligeables et l'approximation pour le Jacobien s'est révélée suffisante dans toutes les expériences numériques effectuées. •

Remarque 5 : La fonctionnelle Φ représente a priori les flux du 2ième ordre. En fait, dans la linéarisation, on ne prend en compte que les flux du 1er ordre pour la détermination des matrices jacobiennes A , B , C , D et E . •

4.4.3 Linéarisation des termes convectifs

L'implicitation des flux convectifs s'effectue en suivant deux approximations classiques :

- le flux numérique de Roe est remplacé par la forme qu'il aurait si $F(W)$ était linéaire. Si \tilde{A} désigne la matrice "moyenne" de type Roe pour le flux $F(W)$, il vient pour la direction i :

$$\phi^{Roe}(W_L, W_R) \simeq \frac{\tilde{A}W_L + \tilde{A}W_R}{2} - |\tilde{A}| \frac{(W_R - W_L)}{2} \quad (4.38)$$

ce qui donne :

$$\phi^{Roe}(W_L, W_R) \simeq \tilde{A}^+ W_L + \tilde{A}^- W_R \quad (4.39)$$

- la seconde approximation consiste à négliger les variations des matrices de Roe par rapport aux variations de W , ce qui conduit à :

$$\delta \phi^{Roe}(W_L, W_R) \simeq \tilde{A}^+ \delta W_L + \tilde{A}^- \delta W_R \quad (4.40)$$

4.5 Terme source chimique

En général, et en particulier pour le type de cinétique chimique air-hydrogène auquel nous nous sommes intéressés, les phénomènes de combustion conduisent à des systèmes d'équations différentielles raides, c'est-à-dire qu'il existe des échelles de temps très disparates au sein de l'écoulement. Lorsque la cinétique globale est en outre fortement exothermique, le problème numérique est sensiblement plus délicat, comme on a pu le voir au chapitre 2. On a présenté au chapitre 3 des méthodes qui pouvaient s'appliquer à des écoulements instationnaires. Toutefois, pour calculer des écoulements stationnaires, ce type d'approche apparaît comme assez coûteuse. Dans [11] est présentée une approche originale fondée sur une limitation spécifique du terme source, liée d'une part au schéma implicite linéarisé, et d'autre part à une analyse de la forme de la cinétique utilisée.

4.5.1 Linéarisation complète

On notera dans la suite et de façon usuelle le terme source chimique $S(W) := \Omega(W)$. Ω est linéarisé par rapport aux variables conservatives. Le terme source d'Arrhenius est le produit

d'un terme en température et d'un terme en les masses volumiques partielles ρ_k :

$$\Omega = \Omega_1(\rho_k) \times \Omega_2(T) \quad (4.41)$$

On notera :

$$\frac{d\Omega}{dW} = \Omega_2 \frac{\partial \Omega_1}{\partial \rho_k} + \Omega_1 \frac{\partial \Omega_2}{\partial T} \otimes \frac{\partial T}{\partial W} \quad (4.42)$$

Dans le terme de droite de (4.42), le premier terme est le jacobien du terme source par rapport aux masses volumiques partielles. Le deuxième terme est le produit de deux vecteurs. Les dérivées partielles du jacobien se déduisent analytiquement à partir de l'expression de $\Omega(W)$, donnée au chapitre 2. Le vecteur $\frac{\partial T}{\partial W}$ s'obtient en dérivant par rapport à W l'équation 4.2, qui définit implicitement T . On obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial W} = \left(\sum_{k=1}^{\kappa} \rho_k \frac{\partial C_{v_k}}{\partial T} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \frac{u^2 + v^2}{2} - TC_{v_k}(T) - h^F_k \\ -u \\ -v \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

Le terme source chimique ne fait intervenir que les variables conservatives locales. L'influence de la chimie consiste alors à simplement ajouter la matrice $-\frac{\partial \Omega(W)}{\partial W}$ à la matrice A définie en (4.34).

4.5.2 Chimie "explosive"

Nous avons vu au chapitre 2 que lorsque la cinétique est raide, mais globalement endothermique ou faiblement exothermique, l'obtention de la solution stationnaire peut s'obtenir à l'aide d'un schéma implicite linéarisé. Lorsque le schéma réactionnel possède un caractère fortement exothermique et rapide, une approche implicite linéarisée, même avec un limiteur de terme source empêchant une trop forte variation des espèces chimiques ou de la température d'un temps au suivant, peut s'avérer inefficace.

Mathématiquement, un schéma réactionnel sera dit explosif si les valeurs propres du jacobien du terme source chimique $\partial \Omega(W)/\partial W$ ne sont pas toutes négatives. La chimie oxygène-azote est un exemple de schéma réactionnel non explosif, alors que la reproduction fidèle de la combustion air-hydrogène semble devoir nécessairement conduire à des schémas réactionnels explosifs.

Considérons alors un système du type :

$$\frac{dW}{dt} = \Omega(W) \quad (4.44)$$

en omettant tous les termes sauf le terme source. Le schéma implicite linéarisé correspondant peut s'écrire, avec $\Delta W = W^{n+1} - W^n$, et n l'avancement en temps :

$$\left[\frac{Id}{\Delta t} - \left(\frac{d\Omega}{dW} \right)^n \right] \Delta W := M \Delta W = \Omega^n \quad (4.45)$$

L'étude menée au chapitre II montre que dans certain cas les schémas implicites conduisent à un comportement hautement instable dans le cas d'une chimie trop fortement exothermique. Une autre tentative de compréhension de ce comportement peut s'effectuer par l'étude du signe des valeurs propres éventuelles du jacobien du terme source.

Si l'on suppose que la matrice M du terme de gauche de l'équation (4.45) est diagonalisable dans \mathbb{R} , il vient que $M = PDP^{-1}$, où $D = \text{Diag}(1/\Delta t - \varsigma_k, k = 1, \dots, \kappa)$, et les ς_k sont les valeurs propres de $\frac{d\Omega}{dW}$. Ce système (4.45) peut alors s'écrire sous la forme :

$$DP^{-1}\Delta W = P^{-1}\Omega^n \quad (4.46)$$

S'il existe alors $k' \in \{1, \dots, \kappa\}$ tel que $\varsigma_{k'} > 0$, la variation correspondante sur $P^{-1}\Delta W$ changera suivant que le pas de temps Δt soit supérieur ou inférieur à $1/\varsigma_{k'}$. En outre, au voisinage de $\Delta t = 1/\varsigma_{k'}$, la matrice M peut ne plus être numériquement inversible, ou encore conduire à un très mauvais conditionnement pour l'inversion du système (4.45). Une valeur propre positive induit ainsi un comportement oscillant et/ou non monotone qui peut s'avérer très fortement déstabilisant lors de la résolution numérique.

Remarque 6 : Sur l'étude menée au chapitre 2, si l'on reprend l'exemple de la réaction unique irréversible, et $W = {}^t(Y, Z)$, on trouve que la valeur propre non nulle du jacobien complet du terme source est égale, avec les notations du chapitre, à $2(-f_1(T) + U f_1'(T) = 2f_1((\beta + E_1/RT)U/T - 1)$. Pour les valeurs typiques considérées au chapitre 2 d'une chimie exothermique rapide, cette valeur propre est positive, alors qu'elle est négative pour une chimie endothermique ou faiblement exothermique. Il est alors cohérent de remarquer que l'analyse de ce chapitre conduit à observer un comportement hautement instable dans le cas d'une chimie explosive pour le schéma implicite linéarisé couplé, qui est l'analogue du schéma implicite présenté ici. •

L'idée développée dans [11] consiste à appliquer un limiteur sur le terme source, de telle sorte que les matrices à inverser dans le schéma implicite linéarisé aient toutes leurs valeurs propres positives. Plus précisément, l'application de la procédure de relaxation (4.36)-(4.37) conduit à :

$$\left[\frac{Id}{\Delta t} + A_{i,j} - \frac{\partial \Omega}{\partial W_{ij}} \right]^n \Delta W_{ij} = - [\text{termes croisés en } i+1, i-1, j+1, i-1]^n + \Phi_{ij}^n \quad (4.47)$$

Formellement, la stratégie proposée conduit à essayer de rendre le système [équations d'Euler + combustion] "non explosif" lors de la résolution numérique en limitant le terme source, c'est-à-dire à le multiplier par un coefficient λ_{ij} positif et inférieur à un. La solution stationnaire sera obtenue au bout d'un nombre suffisant d'itérations. Le limiteur sera devenu inactif si l'on est suffisamment maillé pour résoudre la chimie.

La limitation est fondée d'une part sur la connaissance de l'ordre de grandeur de la plus petite valeur propre de la matrice $A_{i,j}^n$ définie pour le schéma implicite linéarisé des équation de convection pure (cf. eq. (4.34)), si l'on ne prend en compte pour la limitation les effets

convectifs, effectivement prépondérants. Ce premier estimateur vaut :

$$\lambda_{min}^{Euler} = 1 + \frac{\Delta t}{\text{Aire}(C_{i,j})} \Delta \sigma_{i+\frac{1}{2},j} \min(|u|, |u - c|) \quad (4.48)$$

Si l'on connaît en outre une estimation λ_{max}^{Comb} de la plus grande valeur propre du jacobien complet du terme source chimique, le limiteur $\lambda_{i,j}$ sera alors pris tel que:

$$\lambda_{min}^{Euler} - \Delta t \lambda_{i,j} \lambda_{max}^{Comb} \geq \alpha \lambda_{min}^{Euler} \quad (4.49)$$

avec $0 < \alpha < 1$, coefficient de sécurité. Terme source et jacobien seront multipliés par $\lambda_{i,j}$.

L'estimateur λ_{max}^{Comb} est évalué de façon semi-empirique [11], moins coûteuse qu'une évaluation itérative. D'une manière générale, ces estimateurs sont négatifs dans les zones de l'écoulement où la chimie n'est pas explosive, et sont positifs dans les zones où le jacobien du terme source chimique possède effectivement une valeur propre strictement positive.

Chapitre 5

Modèle de turbulence

5.1 Introduction

La modélisation des écoulements turbulents, réactifs ou inertes, est encore un problème largement ouvert. Dans l'optique de simuler la combustion turbulente d'une couche de mélange air-hydrogène, nous décrivons ici le modèle de turbulence à deux équations utilisé. Ce modèle est de type $k - \epsilon$ [16] et couplé au solveur du système de Navier-Stokes.

La section 5.2 présente l'approche par analyse statistique classique, permettant de moyenner les équations de Navier-Stokes et de faire apparaître des termes de corrélation entre les fluctuations turbulentes. L'hypothèse de Boussinesq, relative à l'introduction de la viscosité turbulente, ainsi que des modèles algébriques et à une ou deux équations, seront également évoqués dans cette section. Le système couplé des équations régissant l'évolution de l'énergie turbulente k et de son taux de dissipation ϵ est ensuite présenté section 5.4. Nous indiquons au paragraphe suivant 5.5 la stratégie numérique employée pour résoudre ce système, en particulier en vue de maintenir la positivité des grandeurs k et ϵ [17, 18, 19].

5.2 Equations de Reynolds

Les équations de Navier-Stokes constituent une description Eulérienne du mouvement d'un fluide. Le fluide est considéré comme un milieu continu et on observe l'évolution des caractéristiques du fluide en un point de l'espace physique. Un "point" physique peut se définir comme un élément de volume contenant suffisamment de particules pour pouvoir déterminer de façon statistique dans l'élément les grandeurs physiques macroscopiques comme la température, la pression ou la vitesse, mais ayant des dimensions microscopiques à l'échelle de l'écoulement. Au sein d'un écoulement réel turbulent, les grandeurs physiques ainsi définies varient très rapidement en temps et en espace. Le modèle des équations de Navier-Stokes contient le germe du phénomène turbulent, et est capable de traduire les phénomènes de développement des instabilités, ainsi que le transfert énergétique - la cascade énergétique -

depuis les grosses structures vers les petites structures dissipatives, c'est-à-dire des basses fréquences vers les hautes fréquences de l'écoulement. Les études de simulation numérique directe - ou D.N.S. - [20] permettent ainsi d'effectuer de véritables expériences numériques, pouvant se comparer de façon précise aux résultats de mesures, et fournissant qui plus est des informations plus complètes. Cette dernière approche devient alors une méthode possible pour résoudre les écoulements turbulents, sans analyse statistique préalable. Cependant, les méthodes numériques utilisées dans cette approche sont en général explicites et d'ordres très élevés. En outre, et c'est sans doute le facteur limitant, la densité du nombre de nœuds des maillages nécessaires à la résolution et le pas de temps très petit qui en découle, rendent encore la simulation directe difficilement accessible au domaine industriel. Typiquement, pour le type d'écoulements qui nous intéresse, la taille des mailles se situe entre 10^{-4} et 10^{-5} m, i.e. $\simeq 10^4$ points par cm^2 du domaine de calcul, et le pas de temps est de l'ordre de 10^{-9} s.

5.2.1 Différentes notions de moyennes

En dehors de la simulation directe, les méthodes numériques couramment utilisées sont trop dissipatives pour rendre compte d'un écoulement autre que laminaire. Si l'on veut conserver le même type de méthodes, une modélisation supplémentaire, conduisant à une modification du système d'équations, semble incontournable. Une approche possible consiste alors à ne s'intéresser qu'aux quantités moyennes des caractéristiques de l'écoulement et de modéliser l'effet des grandeurs fluctuantes sur l'écoulement "moyen".

Soit $\phi(\mathbf{x}, t)$ une fonction réelle décrivant une grandeur physique de l'écoulement, dépendant du temps t et des coordonnées d'espaces \mathbf{x} . Si l'on introduit la fonction de densité de probabilité relative à ϕ , $P(\phi)$, la probabilité $\pi[a, b]$ pour que ϕ soit compris entre les deux valeurs a et b est par définition :

$$\pi[a, b] := \int_a^b P(\phi) d\phi \quad (5.1)$$

Lorsque l'on effectue l'intégration sur \mathbb{R} entier, la probabilité devient bien sûr égale à l'unité : $\int_{-\infty}^{+\infty} P(\phi) d\phi = 1$. En outre, si l'on prend le moment d'ordre un de cette densité de probabilité, on obtient la valeur moyenne de ϕ , notée $\langle \phi \rangle$:

$$\langle \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi P(\phi) d\phi \quad (5.2)$$

Ce type d'approche nécessite toutefois d'estimer $P(\phi)$ ou bien à l'aide d'une équation ([21], ce qui nécessite un effort de modélisation, ou bien en se donnant a priori la forme de $P(\phi)$, en estimant seulement certains paramètres relatifs à cette forme. Nous reviendrons sur cette dernière approche lorsque nous aborderons la modélisation de la combustion turbulente.

Cette moyenne statistique est formellement une moyenne d'ensemble, i.e. idéalement la moyenne sur un grand nombre de réalisations identiques de l'écoulement. L'hypothèse d'ergodicité consiste à supposer que l'on peut remplacer cette moyenne statistique d'ensemble

par une moyenne temporelle ou spatiale, lorsque la turbulence est localement stationnaire ou homogène. En pratique, bien sûr, les écoulements étudiés ne sont pas vraiment stationnaires ni homogènes.

Une moyenne temporelle $\langle \phi \rangle_\tau$ de ϕ , au point \mathbf{x} et autour du temps t , relative à l'échelle de temps τ , peut par exemple être définie selon :

$$\langle \phi \rangle_\tau (\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{+\frac{\tau}{2}} \phi(\mathbf{x}, t + \theta) d\theta \quad (5.3)$$

Le point crucial est alors de définir l'échelle de temps τ . Dans la limite de la turbulence stationnaire, $\tau \rightarrow +\infty$. Pour une turbulence quasi-stationnaire, τ devra être choisi "grand". Notons τ^T l'échelle temporelle de variation des fluctuations turbulentes, et τ^M l'échelle temporelle de variation de l'écoulement macroscopique. τ^T est alors en général très petit devant τ^M . Supposons alors qu'il existe une échelle de temps τ intermédiaire au sein de l'écoulement telle que $\tau^T \ll \tau \ll \tau^M$. L'échelle de temps τ est alors choisie pour effectuer les moyennes temporelles. On peut également de façon analogue définir une moyenne dans un volume V , autour d'un point physique. Toujours selon l'hypothèse ergodique, la moyenne spatiale, la moyenne temporelle et la moyenne statistique sont identiquement égales. On utilisera dans la suite l'opérateur de moyenne temporelle, le mieux adapté dans ce cas pour effectuer la moyenne des équations de Navier-Stokes.

Cet opérateur de moyenne est bien sûr linéaire et il commute avec l'opérateur de dérivation par rapport au temps ou aux coordonnées d'espace. Il est usuel de séparer chaque variable en une quantité moyenne, notée $\bar{\phi}$, et une quantité fluctuante, notée ϕ' , de moyenne temporelle nulle. Lorsque l'on effectue la moyenne d'un produit de deux grandeurs ϕ_1 et ϕ_2 , on obtient la moyenne du produit et un terme supplémentaire, dit de corrélation, moyenne du produit des quantités fluctuantes :

$$\overline{\phi_1 \phi_2} = \overline{(\phi_1 + \phi'_1)(\phi_2 + \phi'_2)} = \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 + \overline{\phi'_1 \phi'_2} \quad (5.4)$$

On peut bien sûr définir de façon similaire des corrélations pour un nombre de grandeurs supérieur à deux.

Certains auteurs [22, 23, 24, 25, 26, 27] ont également introduit une moyenne temporelle pondérée par la masse volumique, usuellement appelée moyenne de Favre. Ce type de moyenne peut s'avérer plus intéressant lorsque l'on considère des écoulements à masse volumique variable. Elle peut s'écrire formellement comme une moyenne statistique en introduisant la densité de probabilité conjointe $\tilde{P}(\rho, \phi)$, où ϕ désigne une variable physique différente de la masse volumique et de la pression. La densité de probabilité conjointe permet d'accéder à la probabilité $\pi([\rho_1, \rho_2]; [a, b])$ pour que $\rho_1 \leq \rho \leq \rho_2$ et $a \leq \phi \leq b$, selon :

$$\pi([\rho_1, \rho_2] \times [a, b]) := \int_{\rho_1}^{\rho_2} \int_a^b \tilde{P}(\rho, \phi) d\phi d\rho \quad (5.5)$$

On peut alors définir une densité de probabilité pour ϕ , pondérée par la masse volumique [28], selon :

$$\tilde{P}(\phi) = \frac{1}{\rho} \int_0^\infty \rho \tilde{P}(\rho, \phi) d\rho \quad (5.6)$$

La moyenne de Favre $\tilde{\phi}$ de ϕ sera alors égale à :

$$\tilde{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \tilde{P}(\phi) d\phi \quad (5.7)$$

Le lien avec la moyenne temporelle non pondérée découle de façon directe des définitions de ces moyennes :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (5.8)$$

On peut de nouveau décomposer la grandeur ϕ en une quantité moyennée et une quantité fluctuante : $\phi = \tilde{\phi} + \phi''$. La moyenne pondérée de ϕ'' est nulle, $\tilde{\phi}'' = 0$, mais a priori sa moyenne non pondérée est différente de zéro : $\overline{\phi''} \neq 0$.

On peut aussi, toujours directement à partir des définitions, obtenir le système de relations suivant entre les deux formalismes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\phi} = \bar{\phi} + \frac{\overline{\rho'\phi'}}{\bar{\rho}} \\ \overline{\rho\phi'} = 0 \\ \tilde{\phi}'' = -\frac{\overline{\rho'\phi''}}{\bar{\rho}} = -\frac{\overline{\rho'\phi'}}{\bar{\rho}} \\ \widetilde{\phi''\psi''} = \overline{\phi''\psi''} - \frac{1}{\bar{\rho}^2} \overline{\rho'\phi'\rho'\psi''} + \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\rho'\phi'\psi''} \end{array} \right. \quad (5.9)$$

où ϕ et ψ désignent des grandeurs physiques autres que la pression et la masse volumique.

5.2.2 Equations moyennées

A l'aide des différentes moyennes définies au paragraphe précédent, il est possible d'obtenir les équations de Navier-Stokes moyennées, incompressibles ou compressibles [29, 30, 31, 32]. Comme nous allons le voir dans ce qui suit, cette opération fait alors apparaître des termes de corrélation supplémentaires entre les quantités fluctuantes de l'écoulement, en particulier les corrélations entre les composantes de vitesse.

Nous reprenons les notations du chapitre 4, sauf pour les coordonnées de la vitesse, notées v_i, v_j ou v_k . En outre, on notera respectivement E et ε les énergies totale et interne massiques de l'écoulement, et on ne suppose a priori aucune forme particulière pour ε . On adopte la notation d'Einstein pour la sommation des indices répétés. Les notations \cdot_t et \cdot_i désignent respectivement les opérations de dérivations partielles par rapport au temps et à la i -ème coordonnée d'espace.

Pour l'équation de continuité, $\rho_{,t} + (\rho v_i)_{,i} = 0$, l'opération de moyenne pondérée par la masse volumique conduit à :

$$\bar{\rho}_{,t} + (\bar{\rho} \tilde{v}_i)_{,i} = 0 \quad (5.10)$$

équation formellement similaire à l'équation non moyennée et qui ne fait pas apparaître de termes de corrélations.

Pour la i -ème composante, l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit $(\rho v_i)_{,t} + (\rho v_i v_j)_{,j} = (\sigma_{ij})_{,j}$. Le tenseur des contraintes est défini selon $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + \mu\tau_{ij}$ où $\tau_{ij} = (v_i)_{,j} + (v_j)_{,i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}(v_k)_{,k}$ désigne le tenseur des contraintes visqueuses. Sous ces notations, l'équation moyennée prend la forme :

$$(\bar{\rho} \tilde{v}_i)_{,t} + (\bar{\rho} \tilde{v}_i \tilde{v}_j)_{,j} = -(\overline{\rho v_i'' v_j''})_{,j} - \bar{P}_{,i} + (\mu \overline{\tau_{ij}})_{,j} \quad (5.11)$$

Les termes supplémentaires en $(\tau_{ij}^{Re}) = -\overline{\rho v_i'' v_j''} = -\bar{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''}$ constituent le tenseur des contraintes de Reynolds. Le point crucial de l'approche par analyse statistique présentée ici est de modéliser les différentes corrélations qui apparaissent en plus dans les équations, et en particulier de modéliser les contraintes de Reynolds.

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit $(\rho E)_{,t} + (\rho v_j E)_{,j} = (v_i \sigma_{ij})_{,j} - (q_j)_{,j}$. q_j désigne le flux de chaleur qui sera supposé suivre une loi de Fick selon $q_j = -KT_{,j}$. La moyenne s'écrit :

$$(\bar{\rho} \tilde{E})_{,t} + (\bar{\rho} \tilde{v}_j \tilde{E})_{,j} = -(\overline{\rho v_j'' E})_{,j} + (\overline{\sigma_{ij} v_i})_{,j} - (\bar{q}_j)_{,j} \quad (5.12)$$

La relation constitutive $E = \varepsilon + \frac{v_i v_i}{2}$ se moyenne en

$$\tilde{E} = \tilde{\varepsilon} + \frac{\tilde{v}_i \tilde{v}_i}{2} + k \quad (5.13)$$

La notation usuelle k désigne l'énergie cinétique turbulente qui vaut :

$$k = \frac{\widetilde{v_i'' v_i''}}{2} \quad (5.14)$$

L'équation de conservation de l'énergie est souvent remplacée, dans les problèmes de combustion turbulente, par l'équation relative à l'enthalpie. Toutefois, dans l'approche de la combustion turbulente exposée au chapitre 7 - fonction de densité de probabilité présumée en température -, nous ne ferons pas intervenir l'équation de l'énergie sous cette forme.

On peut également écrire une équation moyennée pour l'équation de conservation d'un scalaire, et en particulier, l'équation moyennée de conservation des espèces chimiques. Dans le modèle envisagé, cette équation est formellement identique à l'équation non-moyennée.

5.3 Transport turbulent

Les premiers et les plus simples des modèles de turbulence sont les modèles dits algébriques. Leur point de départ est l'hypothèse de la viscosité turbulente de Boussinesq. Celle-ci consiste à modéliser les contraintes de Reynolds comme le produit des contraintes moyennes de déformation $\tilde{\tau}$ par un coefficient μ_t appelé viscosité turbulente :

$$-\bar{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''} = \mu_t \left(\tilde{v}_{i,j} + \tilde{v}_{j,i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \tilde{v}_{k,k} \right) \quad (5.15)$$

Il est toutefois important de noter que, pour les écoulements compressibles, il est usuel de rajouter au membre de gauche de l'équation (5.15) un terme supplémentaire correspondant à la viscosité en volume, habituellement négligée dans le modèle laminaire, comme au chapitre 4 :

$$-\bar{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''} = \mu_t \left(\widetilde{v_{i,j}} + \widetilde{v_{j,i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \widetilde{v_{k,k}} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \quad (5.16)$$

Ce terme supplémentaire correspond à une moyenne des contraintes normales et empêche a priori la trace du tenseur des contraintes de Reynolds de s'annuler.

L'accès aux contraintes de Reynolds se réduit alors à la modélisation de la viscosité turbulente μ_t , ainsi qu'à l'estimation de l'énergie cinétique turbulente k , si l'on prend en compte le terme supplémentaire énergétique en k de (5.16).

Après Boussinesq, Reynolds supposa que les mécanismes apparents de transport par la turbulence de la quantité de mouvement et de la chaleur étaient identiques. De la même façon que Boussinesq introduisit une viscosité turbulente, il introduisit un coefficient de diffusion thermique turbulent K_t , qui se traduit par l'introduction d'un nombre de Prandtl turbulent Pr_t :

$$Pr_t = \mu_t \frac{c_p}{K_t} \quad (5.17)$$

que l'on prendra égal à 0.9.

De façon strictement parallèle est introduit un nombre de Schmidt turbulent pour le transport des espèces chimiques, qui permet de déterminer un coefficient de diffusion massique turbulent selon :

$$\rho D_t = \frac{\mu_t}{Sch_t} \quad (5.18)$$

5.3.1 Modèles algébriques

Les modèles algébriques omettent le dernier terme en k pour l'énergie. Fondés sur des hypothèses d'équilibre local de l'écoulement, ces modèles essaient de fournir directement une expression pour μ_t en fonction de variables connues de l'écoulement moyen, comme par exemple le gradient de vitesse, la vorticit  locale, la distance à la paroi, ou encore des épaisseurs intégrales de couches limites. Le plus célèbre d'entre eux est sans doute le modèle de longueur de mélange de Prandtl (1925). Par une analyse dimensionnelle élémentaire, il apparaît que μ_t est le produit d'une vitesse par une longueur. Pour un écoulement de type couche limite, l'expression proposée pour μ_t est :

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} \right| \quad (5.19)$$

où $\left| \frac{d\bar{U}}{dy} \right|$ désigne le gradient de la vitesse moyenne longitudinale \bar{U} par rapport à la direction transversale y à l'écoulement moyen. L'échelle de mélange l_m reste alors à être déterminée, et ce, de façon empirique. Pour les écoulements libres, comme les couches de mélanges, les

jets ou les sillages, l_m est supposé demeurer constant dans chaque section transversale et être proportionnel à l'épaisseur de la couche de mélange. Le facteur de proportionnalité dépend en fait de l'écoulement considéré. Par exemple, pour des écoulements au voisinage d'une paroi, Von Karman propose une expression pour l_m selon :

$$l_m = \kappa \frac{\left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} \right|}{\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}} \quad (5.20)$$

où κ désigne la constante universelle de Von Karman, $\kappa \simeq 0.41$. Dans le cas d'une couche limite, pour la région au voisinage de la paroi, l'expression $l_m = \kappa y$, déduite d'observations expérimentales [33], semble pertinente pour $y < 0.20\delta$, où δ est l'épaisseur de couche limite. Pour $y > \delta$, on peut prendre $l_m = C\delta$, où la valeur de la constante C dépend de la définition de l'épaisseur de couche limite δ et varie entre 0.075 et 0.090. Près des parois, on peut également faire intervenir un facteur d'intermittence, rapport du temps où l'écoulement local est effectivement turbulent, par pénétration d'un paquet de fluide turbulent, sur le temps total.

On pourra se reporter par exemple à [34, 35, 36] pour une revue plus détaillée de modèles algébriques.

On déduit de ce qui précède que le choix d'une longueur de mélange est très fortement lié à l'écoulement, et ces modèles ont donc un caractère très spécifique. L'approche de Prandtl a tout de même le grand avantage de la simplicité et il est en outre bien adapté à des situations d'écoulements turbulents classiques. Il permet dans bien des cas d'obtenir des expressions analytiques pour des caractéristiques de l'écoulement. Ces expressions, même si elles sont établies dans un cadre simplifié fournissent un élément de comparaison pour les résultats de calculs numériques obtenus avec des modèles plus élaborés.

5.3.2 Equation de bilan pour l'énergie cinétique turbulente

Afin de rendre compte d'effets non localisés en temps et en espace sur la viscosité turbulente, Prandtl essaya d'écrire une équation d'évolution pour une vitesse caractéristique de la turbulence v' . Le but était de contourner le choix $v_{\text{turbulente}} = l_m |\partial U / \partial y|$, qui intervient implicitement dans le modèle algébrique. Il choisit l'énergie cinétique turbulente par unité de masse k comme référence pour sa vitesse et obtint comme expression pour la viscosité turbulente :

$$\mu_t = \rho l \sqrt{k} \quad (5.21)$$

où l , longueur caractéristique de turbulence, "ressemble" à une longueur de mélange. l est encore une fois spécifiquement liée au type d'écoulement [35, 34].

De façon indépendante de la détermination de l'échelle de mélange, il est possible, en effectuant une série de manipulations algébriques à partir des équations de Navier-Stokes,

d'obtenir une équation de bilan sur les contraintes de Reynolds. Puisque l'énergie cinétique turbulente k n'est autre que la trace du tenseur des contraintes de Reynolds divisé par $2\bar{\rho}$ [36, 35, 37], on déduit directement l'équation sur k :

$$(\bar{\rho}k)_{,t} + [\bar{\rho}\tilde{v}_j k + \bar{\rho}\widetilde{v_j'' k}]_{,j} = -\overline{v_j P'} + \mu\overline{v_j'' \tau_{ij}} - \bar{\rho}\widetilde{v_i'' v_j'' \tilde{v}_{i,j}} + \overline{P' v_{i,i}} - \overline{v_i'' P} - \mu\overline{\tau_{ij} v_{i,i}} \quad (5.22)$$

On peut remarquer que cette dernière équation fait intervenir un terme de corrélation entre les fluctuations de pression et la divergence de la vitesse, ainsi qu'un terme incluant le gradient de pression de l'écoulement moyen. Ces termes sont reliés aux effets dus à la compressibilité. Ils n'existent pas pour une turbulence incompressible, ou sont négligés lorsque le nombre de Mach est "petit".

L'inconvénient majeur de cette approche réside encore dans l'estimation d'une longueur caractéristique spécifique à chaque écoulement turbulent, même si l'on a "éloigné" le problème d'un ordre.

5.4 Un modèle à deux équation : $k - \epsilon$

Afin de repousser d'un ordre encore l'indétermination liée au choix de la longueur de mélange, on peut chercher à écrire une équation supplémentaire sur une autre variable, et de déduire la viscosité turbulente à partir de ces deux variables. Diverses approches ont été proposées correspondant à plusieurs choix pour les deux variables turbulentes. Le modèle le plus couramment utilisé reste cependant le modèle $k - \epsilon$, où les deux variables considérées sont l'énergie cinétique turbulente k , et son taux de dissipation par unité de masse ϵ . Par des considérations purement dimensionnelles, il est aisé de constater que le rapport $\rho k^2/\epsilon$ a la dimension d'une viscosité. Si l'on pose :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (5.23)$$

le problème peut être ainsi complètement fermé si l'on sait trouver deux équations pour k et ϵ .

5.4.1 Equation sur k

Essayons d'abord d'interpréter la signification de chaque terme intervenant dans l'équation (5.22) en k , afin de pouvoir les modéliser ou les négliger. Après développement et réduction, l'équation (5.22) peut se réécrire selon :

$$(\bar{\rho}k)_{,t} + (\bar{\rho}\tilde{v}_j k)_{,j} = -\overline{\rho v_i'' v_j'' \tilde{v}_{i,j}} \quad (5.24)$$

$$+ (\overline{v_i'' \tau_{ij}} + \frac{1}{2} \overline{\rho v_j'' v_i'' v_i''} - \overline{P' v_j''})_{,j} \quad (5.25)$$

$$- \overline{\tau_{ij} v_{i,j}} \quad (5.26)$$

$$- \overline{P_{,i} v_i''} + \overline{P' v_{i,i}} \quad (5.27)$$

Les termes de chaque membre de cette égalité peuvent se traduire comme suit :

- le membre de gauche de l'équation représente les termes instationnaires et de convection de l'énergie cinétique turbulente.
- le second membre (5.24) est le terme de production qui représente le taux de transfert de k de l'écoulement moyen vers l'écoulement turbulent. Comme on l'a écrit précédemment, il correspond en fait au travail de déformation des tensions de Reynolds. Pour modéliser ce terme, on fera appel à l'hypothèse de Boussinesq.
- les termes (5.25) sont assimilés à des termes de diffusion. Le premier terme représente une diffusion moléculaire, le deuxième terme est un transport turbulent de k c'est-à-dire qu'il reflète le transport de l'énergie cinétique par les fluctuations turbulentes à travers le fluide. Enfin le dernier terme de cette expression correspond à une diffusion de pression, c'est-à-dire une autre forme de transport turbulent qui résulte des corrélations entre les fluctuations de pression et de vitesse. Jusqu'à des nombres de Mach de l'ordre de 5, ces corrélations seront considérées comme négligeables.
- le terme (5.26) correspond à la dissipation de l'énergie cinétique par la viscosité moléculaire, faisant justement intervenir ϵ le taux de dissipation de k par unité de masse.
- les termes (5.27) représentent respectivement le travail de la pression pour le premier terme, la dilatation de pression pour le second. Pour les écoulements dont les caractéristiques sont proches de l'incompressible, le travail de la pression disparaît car $\overline{v_i''}$ est petit et le terme de dilatation disparaît car la divergence de la vitesse est alors nulle.

Regardons maintenant comment simplifier l'écriture de l'équation sur k , et en particulier comment modéliser les termes de diffusion 5.25.

5.4.2 Modélisation de $\overline{v_i'' \tau_{ij}}$

Le développement de ce terme fait apparaître des termes de la forme :

$$\begin{aligned} \overline{\mu v_{i,j} v_i''} &= \overline{\rho \nu (\tilde{v}_{i,j} + v_{i,j}'') v_i''} \\ &= \tilde{v}_{i,j} \overline{\rho \nu v_{i,j}''} + \overline{\rho \nu v_{i,j}'' v_i''} \end{aligned} \quad (5.28)$$

En négligeant les corrélations doubles et triples entre les fluctuations de la viscosité, de la masse volumique et de la vitesse, le premier terme disparaît. Le second terme s'écrit selon :

$$\overline{\rho \nu v_{i,j}'' v_i''} = \bar{\rho} \tilde{\nu} k_{,j} = \bar{\mu} k_{,j} \quad (5.29)$$

en négligeant les fluctuations de la viscosité. Il reste finalement :

$$\overline{v_i'' \tau_{ij}} = (\bar{\mu} k_{,j})_{,j} \quad (5.30)$$

5.4.3 Modélisation de $\frac{1}{2}(\overline{\rho v_j'' v_i'' v_i''})_{,j}$

La modélisation la plus courante pour ce terme est :

$$\frac{1}{2}(\overline{\rho v_j'' v_i'' v_i''})_{,j} = \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} k_{,j}\right)_{,j} \quad (5.31)$$

ce qui permet d'assurer la conservation de l'énergie totale qui comprend l'énergie cinétique turbulente.

5.4.4 Equation finale sur k

Finalement, l'équation de transport sur k s'écrit :

$$\begin{cases} (\bar{\rho}k)_{,t} + (\bar{\rho}\tilde{v}_j k)_{,j} - ((\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_k})k_{,j})_{,j} = \mathcal{P}_k - \bar{\rho}\epsilon - \overline{P_{,i}v_i''} + \overline{P'v_{i,i}'} \\ \mathcal{P}_k = (\mu_t(\tilde{v}_{i,j} + \tilde{v}_{j,i} - \frac{2}{3}\tilde{v}_{k,k}\delta_{ij}) - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij})\tilde{v}_{i,j} , \sigma_k = 1 \end{cases} \quad (5.32)$$

où les deux derniers termes “compressibles” ne seront en fait pas pris en compte dans nos calculs. Certains auteurs [38, 39] ont proposés diverses approches pour tenir compte de la “correction” compressible, mais son effet reste faible pour nos écoulements.

5.4.5 Equation sur ϵ

A partir des dérivées spatiales des fluctuations de la vitesse, il est possible de déterminer une équation sur ϵ . Malheureusement, elle fait intervenir de nombreuses corrélations inconnues qu'il est parfois impossible de modéliser et d'autant plus compliquées lorsque l'on utilise la moyenne de Favre. Il est maintenant admis d'adopter alors pour ϵ l'équation du modèle original de Jones et Launder [40] établie pour les écoulements incompressibles. Elle présente l'avantage d'avoir une forme similaire à l'équation de transport de k . Les mécanismes de dissipation par la viscosité moléculaire existent surtout pour les petites structures et sont marqués par un caractère isotrope. Le taux de dissipation ϵ est égal à $\overline{\tau_{ij}\tilde{v}_{i,j}}/\bar{\rho}$. Il peut se simplifier par :

$$\begin{aligned} \bar{\rho}\epsilon &= \overline{\mu(v_{i,j}'' + v_{i,j}' - \frac{2}{3}v_{k,k}''\delta_{ij})v_i''} \\ &= \frac{1}{2}\overline{\mu(v_{i,j}'' + v_{j,i}'')^2} - \frac{2}{3}\overline{\mu v_{k,k}''^2} \end{aligned} \quad (5.33)$$

qui se simplifie lorsque l'écoulement est incompressible selon :

$$\bar{\rho}\epsilon = \frac{1}{2}\overline{\mu(v_{i,j}'' + v_{j,i}'')^2} \quad (5.34)$$

L'équation sur ϵ finalement utilisée s'écrit :

$$\begin{cases} (\bar{\rho}\epsilon)_{,t} + (\bar{\rho}\tilde{v}_j \epsilon)_{,j} - ((\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon})\epsilon_{,j})_{,j} = C_1 \frac{\epsilon}{k} \mathcal{P}_k - \bar{\rho}C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \\ \sigma_\epsilon = 1.3 , C_1 = 1.44 , C_2 = 1.92 \end{cases} \quad (5.35)$$

5.5 Traitement numérique

Les grandeurs k et ϵ sont des grandeurs essentiellement positives. On espère donc que le schéma numérique sera capable de préserver cette propriété tout au long du calcul.

La résolution globale du système { Navier-Stokes + $k - \epsilon$ } s'effectue de façon découplée. Désignons par n l'avancement en temps et par W le vecteur des variables conservatives du système de Navier-Stokes. A partir de W^n , k^n et ϵ^n (et donc μ_t^n), on déduit W^{n+1} . Puis, à partir de W^{n+1} et des grandeurs turbulentes n , on déduit k^{n+1} et ϵ^{n+1} et μ_t^{n+1} .

5.5.1 Schéma monotone pour l'advection

Sous forme compacte, on peut écrire les deux équations sur k et ϵ de la façon suivante (on omet les barres de moyenne) :

$$\rho \frac{\partial s_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla s_i - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_i} \right) \nabla s_i \right) = H_i \quad (5.36)$$

où H_i désigne le terme source.

Le schéma utilisé est celui développé par Deconinck et Roe dans [41]. Sa caractéristique essentielle à notre égard est sa monotonie et sa faible diffusivité [18]. La monotonie permet de préserver la positivité de k et ϵ . La faible diffusivité numérique permettra une analyse fine des modèles de turbulence testés. Ce schéma n'est toutefois codé pour l'instant que pour une formulation éléments finis triangulaires. L'interface avec la code Navier-Stokes s'effectue en projetant les variables conservatives de la grille volumes-finis au maillage éléments-finis, par interpolation bilinéaire.

5.5.2 Discrétisation temporelle

Le schéma utilisé est un schéma implicite linéarisé. Les termes sources sont incomplètement linéarisés, et de façon approchée [17, 19]. Si $H_i = H_i^+ - H_i^-$, où H_i^+ et H_i^- sont tous deux positifs, H_i^+ est traité de façon explicite tandis que H_i^- est traité de façon semi-implicite. Le schéma global s'écrit selon :

$$\begin{cases} \rho^n \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\epsilon^n}{k^n} \right) k^{n+1} + \rho^n \mathbf{v}^n \cdot \nabla k^{n+1} - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t^n}{\sigma_k} \right) \nabla k^{n+1} \right) = \frac{\rho^n k^n}{\Delta t} + \mathcal{P}_k^n, \\ \rho^n \left(\frac{1}{\Delta t} + C_2 \frac{\epsilon^n}{k^n} \right) \epsilon^{n+1} + \rho^n \mathbf{v}^n \cdot \nabla \epsilon^{n+1} - \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t^n}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon^{n+1} \right) = \frac{\rho^n \epsilon^n}{\Delta t} + C_1 \frac{\epsilon^n}{k^n} \mathcal{P}_k^n. \end{cases} \quad (5.37)$$

5.5.3 Résolution du système

Le système (5.37) conduit à la résolution d'un système linéaire, de type $\mathcal{J}^n \Delta^n \mathbf{s} = \mathbf{R}^n$. Du fait de la partie advective du système (5.37), la matrice \mathcal{J}^n est non symétrique, mais cependant creuse puisque provenant d'une discrétisation par éléments finis. L'inversion du système

est alors obtenue de façon approchée par l'algorithme GMRes (Generalized Minimal Residual). Comme toute méthode itérative, GMRes est sensible au préconditionnement utilisé. La présence des termes sources requiert une bonne précision dans la résolution et nous contraint à effectuer un nombre d'itérations suffisamment élevé, afin d'obtenir une précision relative de l'ordre du millièrme. On utilise pour accélérer la convergence une factorisation incomplète afin de préserver la même structure creuse à la matrice factorisée. Le préconditionnement peut s'écrire $C = LDU$, où L est triangulaire inférieure, D est diagonale et U est une matrice triangulaire supérieure, correspondant à la factorisation approchée de \mathcal{J}^n . Le nouveau système à résoudre s'écrit :

$$D^{-\frac{1}{2}}L^{-1}\mathcal{J}^nU^{-1}D^{-\frac{1}{2}}\Delta^n s = D^{-\frac{1}{2}}L^{-1}R^n \quad (5.38)$$

Ce préconditionnement, dit "LDU incomplet", nécessite le stockage des trois matrices L , D et U , qui peut s'avérer important. En outre, il requiert quatre produits matrice-vecteur à chaque itération GMRes. La convergence est atteinte en 2 ou 3 itérations, voire une seule [19].

5.5.4 Extension axisymétrique

L'extension axisymétrique consiste souvent, pour préserver la structure du code plan, à simplement rajouter des termes sources "axisymétriques" à la formulation bidimensionnelle plane, apparaissant du fait de l'écriture en coordonnées cylindriques des équations. Dans ce cas, il suffit d'ajouter à H_i les termes H_i^{axi} donnés par, en négligeant les dérivées de μ par rapport à T :

$$H_i^{axi} = \frac{\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_i} \frac{\partial k}{\partial r}}{r} \quad (5.39)$$

où r désigne le rayon en coordonnées cylindriques.

5.5.5 Conditions aux bords

Les valeurs de k et ϵ sont imposées fortement en entrée. La valeur de μ_t est nulle sur les parois, puisque k est nul. Pour la sortie, les valeurs des deux variables sont simplement extrapolées à l'ordre zéro.

Le choix des valeurs d'entrée pour k et ϵ peut s'avérer déterminant, à la fois sur la solution obtenue et surtout sur la stabilité du schéma global, incluant le solveur aérodynamique. Un choix "raisonnable" consiste à prendre k comme une fraction de l'énergie cinétique incidente, puis à déduire ϵ de telle sorte que la viscosité turbulente en entrée corresponde à une valeur petite devant la viscosité physique d'entrée. On initialise ainsi avec des valeurs de k égale à un millièrme de l'énergie cinétique initiale, et on ajuste ϵ pour que μ_t vaille un dix-millièrme ou un cent-millièrme de la valeur physique μ .

Chapitre 6

Quelques validations numériques

On se propose dans cette partie de valider différentes parties du code de résolution : l'implémentation des termes visqueux, des termes de diffusion des espèces, le couplage entre le solveur laminaire et les routines de résolution des équations du modèle $k - \epsilon$. Nous nous intéressons d'abord à l'écoulement le long d'une plaque plane et en particulier à l'obtention des coefficients de frottement en écoulements laminaire ou turbulent. Ceci constitue un essai numérique de référence dans les cadres des écoulements attachés. Nous simulerons ensuite la diffusion massique transversale, au sein d'une couche de mélange laminaire sans effets de viscosité : une couche "de diffusion". Nous mènerons pour terminer une étude relative à la couche de mélange turbulente et à son taux d'ouverture en fonction du nombre de Mach convectif. Cette dernière étude constitue en fait une étude préliminaire classique avant d'aborder l'étude et la modélisation des couches de mélange réactives.

6.1 Plaque plane

6.1.1 Cas laminaire

On s'intéresse à l'écoulement le long d'une plaque plane comme indiqué figure 6.1.

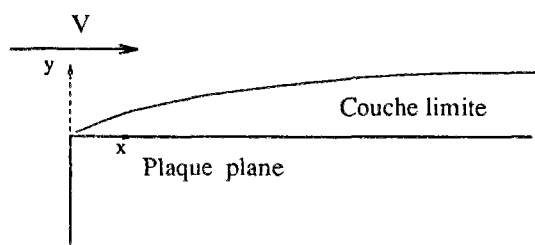


FIG. 6.1 - Couche limite le long d'une plaque plane

U_∞ désigne la vitesse de l'écoulement incident, ν est le coefficient de viscosité cinématique du fluide, x et y sont les coordonnées longitudinale et transversale. L'origine des coordonnées est prise au bord d'attaque.

De façon tout à fait classique, les équations de la couche limite conduisent en l'absence de gradient de pression à l'équation différentielle ordinaire de Blasius [42] pour la fonction de courant adimensionnée f . La fonction f ne dépend que de l'ordonnée adimensionnée $\eta = y(U_\infty/\nu x)^{\frac{1}{2}}$.

Le coefficient de frottement *local* à la paroi est défini par :

$$c'_f = \frac{\tau_0(x)}{\frac{1}{2}\rho U_\infty^2} \quad (6.1)$$

où $\tau_0(x)$ désigne la contrainte de cisaillement locale à la paroi :

$$\tau_0(x) = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} \quad (6.2)$$

où μ désigne la viscosité dynamique. Cette contrainte peut alors directement s'exprimer en fonction de la dérivée seconde α de f en 0, dont la valeur peut être tabulée [43]. On trouve finalement :

$$\tau_0(x) = \alpha \mu U_\infty \sqrt{\frac{U_\infty}{\nu x}} \quad (6.3)$$

et

$$c'_f = 2\alpha \sqrt{\frac{\nu}{U_\infty x}} \quad (6.4)$$

avec $2\alpha = 0.664$. L'expression ci-dessus est valable si l'on suppose que l'écoulement est incompressible. Lorsque l'on veut faire intervenir des effets liés à la compressibilité, il faut alors tenir compte du nombre de Mach incident et de la variation de température, directement liée à la variation de masse volumique par la loi d'état des gaz parfaits. Ainsi, tenir compte de l'interaction entre les couches limites mécanique et thermique conduit à prendre en considération d'autres caractéristiques de l'écoulement. Il s'agit du nombre de Prandtl, Pr , rapport de la diffusivité de quantité de mouvement sur la diffusivité thermique, de la dépendance de la viscosité dynamique μ en température, des conditions aux limites sur la paroi (adiabatique ou avec transfert de chaleur). Comme il n'est certes pas question ici de faire une revue exhaustive de toutes les possibilités étudiées dans la littérature, nous nous limiterons au cas où le nombre de Mach incident est égal à 2, le nombre de Prandtl $Pr = \frac{\mu c_p}{\kappa}$ (les notations sont classiques) à 1, la dépendance de μ en température une fonction puissance $\mu/\mu_0 = (T/T_0)^\omega$. La paroi est supposée adiabatique. On considère un écoulement d'oxygène pur, à $T_\infty = 300$ K et $p_\infty = 0.1$ atm. On prendra $\omega = 1$ pour $\mu(T)$ et $\mu_0 = 2.10^{-5}$ kg.m⁻¹.s⁻¹. Ce cas correspond donc à un nombre de Reynolds incident d'environ $4.3 \cdot 10^6$ par mètre. L'épaisseur théorique de couche de mélange est alors de l'ordre de $5/\sqrt{Re_x}$ pour l'abscisse x , avec $Re_x = \frac{\rho U_\infty x}{\mu}$. Numériquement, pour une plaque de 1 mètre de long, l'épaisseur est de 2.4 mm. Afin de laisser

la couche limite se développer pleinement, et ne pas interférer avec d'éventuelles conditions aux limites, nous considérons un maillage de 61×91 points, de 1 cm d'épaisseur pour 1 m de long. Le premier nœud est à une distance de 5 μm de la paroi, et la longueur de maille varie linéairement ensuite. Les résultats sont montrés figure 6.2. Le nombre de Courant varie linéairement avec les itérations, par pas de 5, et reste inférieur à 150. Le résidu L^2 est divisé par 4000 environ en 200 itérations et 852 s CPU sur un IBM RS 6000 540.

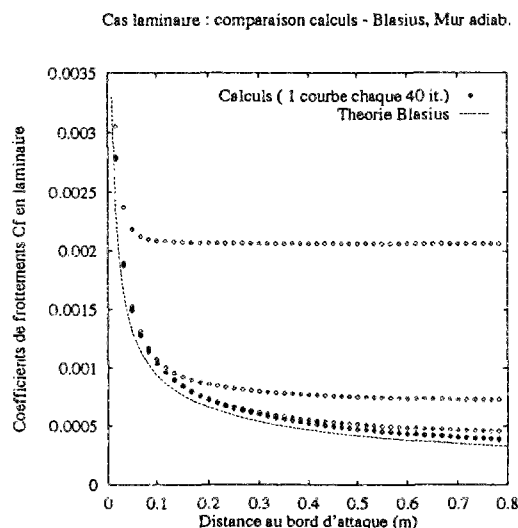


FIG. 6.2 - Coefficients de frottements en laminaire : paroi adiabatique

Nous avons également testé le cas où la température du mur est fixée à celle de l'écoulement incident, cas a priori plus difficile à résoudre numériquement. Nous n'avons cependant pas noté de différence du point de vue de la stabilité. Les conditions opératoires sont identiques, le temps de calcul et la décroissance du résidu très semblables. Les résultats sont portés sur la figure 6.3.

6.1.2 Cas turbulent

Dans [43] est également donnée l'expression du coefficient de frottement déduit de la loi semi-empirique en puissance $1/7$ de distribution de la vitesse longitudinale. L'expression suivante est valable pour un nombre de Reynolds $Re_x = U_\infty x / \nu$ compris entre $5 \cdot 10^5$ et 10^7 (en dessous, l'écoulement est laminaire; au dessus, la loi en puissance $1/7$ n'est plus valable) :

$$c'_f = 2\beta \left(\frac{\nu}{U_\infty x} \right)^{\frac{1}{5}} \quad (6.5)$$

avec $2\beta = 0.0296$. Cette dernière expression n'est valide que dans le cas où l'écoulement est turbulent dès le bord d'attaque de la plaque.

Dans notre cas le nombre de Reynolds par mètre est de l'ordre de quelques millions et entre donc dans le domaine de validité de la formule (6.5). L'épaisseur théorique de couche

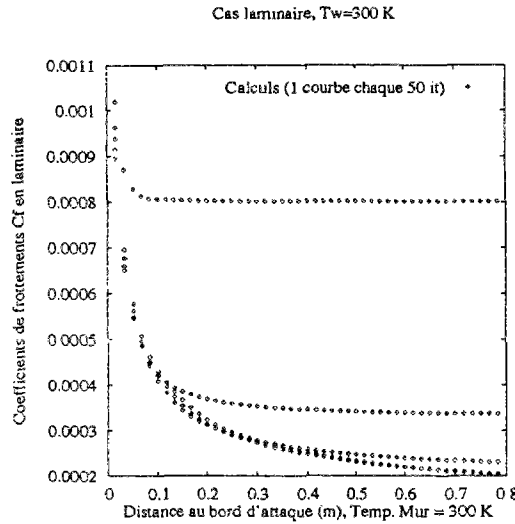


FIG. 6.3 - Coefficients de frottements en laminaire : paroi isotherme

de mélange est cette fois de l'ordre de $0.37xRe_x^{-0.2}$, ce qui correspond ici à environ 1.8 cm. Le maillage est toujours de 61×91 points, pour 100×6 cm. La première maille est encore à $5 \mu\text{m}$, et la taille de maille progresse linéairement. Le nombre de Prandtl turbulent est égal à 0.9. Le coefficient de viscosité est pris constant et égal à 2.10^{-5} . Nous avons également effectué un calcul avec une viscosité "physique", dont les valeurs sont tabulées au préalable et seront celles effectivement utilisées dans nos simulations. Dans les deux cas, nous avons effectués 300 itérations, pour un nombre de Courant progressant jusqu'à 30 par pas de 2 à chaque itération. Le résidu est divisé par 2000 environ et les coefficients de frottements ne varient plus. Le coût du calcul est environ 2.5 fois celui du calcul laminaire. La comparaison entre l'expression théorique obtenue dans le cas où la viscosité est constante et nos calculs est alors tout à fait satisfaisante, comme le montre la figure 6.4. On notera que ces valeurs ne s'éloignent pas trop des valeurs obtenues avec une viscosité "physique" fonction de la température, dont nous avons porté par pas de 50 les 250 dernières itérations sur le schéma de droite de la figure 6.4.

6.2 Couche de diffusion

Dans le but de valider la partie diffusion d'espèces et en particulier son implémentation, nous considérons l'écoulement formé de deux jets parallèles ou coaxiaux, comme montré sur la figure 6.5.

On s'intéresse à l'écoulement établi stationnaire. Afin de pouvoir obtenir une solution analytique de ce problème, nous supposons que chacun des deux jets est composé de deux gaz ayant les mêmes caractéristiques : masses molaires, capacités calorifiques et coefficients de diffusion identiques. Nous étudions en fait mathématiquement et numériquement la diffusion

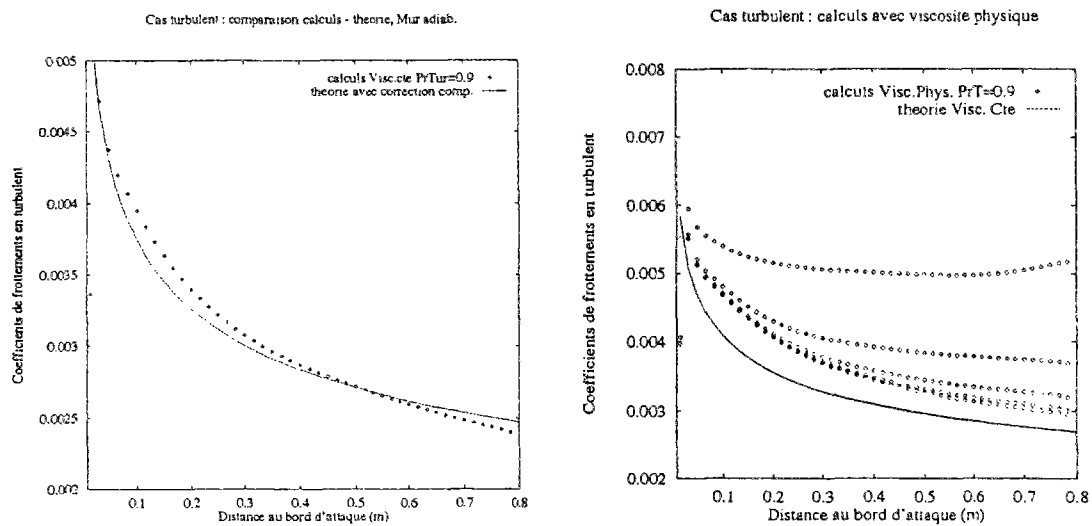


FIG. 6.4 - Coefficients de frottements dans le cas turbulent

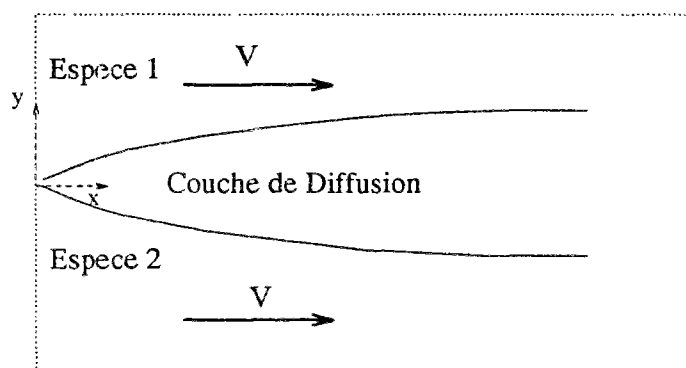


FIG. 6.5 - Couche de diffusion

des molécules “du haut” vers “le bas” et réciproquement. Le coefficient de diffusion de la loi de Fick, D , sera pris uniforme et constant. Nous négligerons en outre la diffusion massique dans le sens de l'écoulement, ce qui est facilement imposable lors de l'expérience numérique puisque l'on décompose les flux dans chaque direction x et y .

Aérodynamiquement, tout se passe comme s'il s'agissait de l'écoulement d'un seul gaz. Les grandeurs physiques comme la pression, la température et la masse volumique seront uniformes et constantes dans tout l'écoulement. La diffusion thermique sera donc absente.

L'équation de conservation de l'espèce (Y désignant par exemple la fraction massique de l'espèce “du haut”) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y \vec{v}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y) \quad (6.6)$$

où ρ désigne la masse volumique. Nous traitons successivement les cas plan et axisymétrique et précisons dans chaque cas quelles conditions aux limites sont utilisées.

6.2.1 Cas plan

Dans le cas plan et compte tenu de nos hypothèses, l'équation (6.6) devient :

$$\alpha \frac{\partial Y}{\partial x} = \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \quad (6.7)$$

avec $\alpha = \frac{u}{D} > 0$. Le problème mathématique consiste donc à trouver $Y = f(x, y)$ vérifiant :

$$\begin{cases} \alpha \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \text{ pour } x \in \mathbb{R}^{+*} \text{ et } y \in \mathbb{R} \\ f(x = 0^+, y) = \mathcal{I}_{r_0}(y) \text{ où } y \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (6.8)$$

avec

$$\mathcal{I}_{r_0}(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } -r_0 \leq y \leq r_0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.9)$$

La résolution de ce système peut s'effectuer à l'aide de transformations fonctionnelles. En annexe sont menés les calculs qui conduisent à l'expression suivante pour Y :

$$f^{\text{plan}}(x, y) = \frac{1}{2} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{(y + r_0) \sqrt{\alpha}}{2 \sqrt{x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{(y - r_0) \sqrt{\alpha}}{2 \sqrt{x}} \right) \right) \quad (6.10)$$

où erf désigne la fonction d'erreur.

6.2.2 Cas axisymétrique

Pour une configuration axisymétrique, le système (6.6) devient : si y désigne cette fois la distance à l'axe,

$$\begin{cases} \alpha \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \frac{\partial f}{\partial y} \right) \text{ pour } x \in \mathbb{R}^{+*} \text{ et } y \in \mathbb{R} \\ f(x = 0^+, y) = \mathcal{I}_{r_0}(y) \text{ où } y \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (6.11)$$

Nous n'avons en fait pu déterminer qu'une seule classe de solutions dans laquelle *n'entre pas* la solution avec condition initiale discontinue. La méthode de la transformation de Laplace, si elle peut théoriquement s'appliquer, ne fournit hélas pas de solution "exploitable", en ce sens qu'elle requiert de savoir calculer la transformée inverse de rapports et produits de fonctions de Bessel modifiées d'ordre nul.

Toutefois, si l'on change les conditions initiales du cas test en les régularisant afin qu'elles soient de la même forme analytique que la solution stationnaire déterminée par le calcul mené en Annexe, on peut trouver l'expression ci-dessous :

$$f^{\text{axi}}(x, y) = \frac{\sqrt{x_0}}{\sqrt{x}} \exp\left(\frac{-\alpha y^2}{8x}\right) I_0\left(\frac{\alpha y^2}{8x}\right) \quad (6.12)$$

où x_0 désigne l'abscisse pour laquelle on a déterminé la condition initiale, et I_0 une des fonctions de Bessel modifiée d'ordre nul.

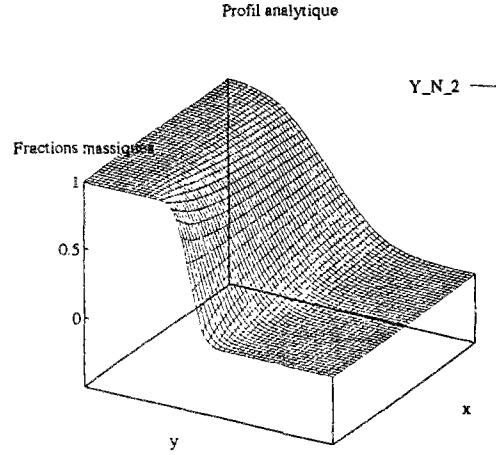
6.2.3 Comparaison calculs-théorie

Pour le cas plan, nous nous sommes intéressés à une géométrie toujours rectangulaire de 61×91 , de 7 cm de large pour 15 cm de long. En x , le maillage est régulier. En y , il est légèrement resseré au centre, avec une raison de 0.99. La discontinuité s'effectue sur une seule maille. Nous avons considéré deux écoulements: $H_2 - H_2$ et $N_2 - N_2$. Pour l'azote, la pression est de 2.10^{-4} atm, la température de 300 K, la viscosité de 2.10^{-5} S.I., la vitesse de 400 m.s^{-1} . Pour l'hydrogène, la pression est 10 fois supérieure, la viscosité est de 9.10^{-6} S.I., la vitesse de 1800 m.s^{-1} . Le nombre de Schmidt, permettant d'accéder au coefficient de diffusion D selon :

$$\rho D = \frac{\mu}{\text{Sch}} \quad (6.13)$$

sera pris égal à 0.7.

Sur la figure 6.6, nous avons d'abord tracé la solution analytique dans tout le domaine pour l'azote. Nous avons ensuite effectué une coupe en $x = 14.375$ cm et porté la différence entre théorie et calcul figure 6.7. Nous avons porté pour H_2 la coupe et la différence en valeurs absolues et relatives figures 6.7.4 et 6.7.1. On peut remarquer que la différence tend à décroître au cours des itérations. Nous avons effectué dans chacun de ces deux cas 800 itérations pour un nombre de Courant égal à 500, croissant par pas de 50 à chaque itération. Les trois courbes de la figure 6.7.4 correspondent aux 150 dernières itérations effectuées. Pour H_2 , nous avons seulement porté le résultat après les 800 itérations. La convergence est donc relativement longue à obtenir: le temps de calcul est de l'ordre de 30 mn. Pour le cas axisymétrique, nous ne nous sommes placés que dans le cas de l'hydrogène, avec des conditions identiques. Nous avons considéré un maillage de 22×10 cm, toujours de 61×91 nœuds, régulier en x . En y , la taille de maille minimale est de 0.6 mm. Le rayon x_0 permettant d'obtenir une solution initiale est pris égal à $x_0 = 0.5$ cm. Les résultats numériques sont donnés figure 6.8, toujours pour les mêmes conditions opératoires.

FIG. 6.6 - Couche de diffusion plane $N_2 - N_2$

La comparaison des ces expressions avec les résultats numériques obtenus s'avère très correcte et constitue une validation numérique tout à fait acceptable de l'implication effectuée.

6.3 Couche de mélange turbulente compressible non réactive

Le but de toute la deuxième partie est de simuler le mélange turbulent et l'allumage d'une couche de mélange supersonique. Une validation numérique préliminaire intéressante consiste alors en la prédiction correcte du taux d'ouverture pour une couche de mélange turbulente compressible non réactive.

Nous nous intéressons à l'écoulement de deux fluides parallèles, correspondant à la situation décrite par la figure 6.9, dont les notations sont claires.

6.3.1 Résultats théoriques et expérimentaux

Les références expérimentales classiques pour ce genre d'écoulement sont les articles de Papamoschou et Roshko [44] et de Brown et Roshko [45]. Ces auteurs définissent entre autres un paramètre commode permettant de caractériser l'épaisseur de la couche de mélange : l'épaisseur de vortacité δ_ω , définie par

$$\delta_\omega(x) = \frac{U_1 - U_2}{\text{Max}_x \frac{\partial U}{\partial y}} \quad (6.14)$$

si x désigne la coordonnée longitudinale et y la coordonnée transversale. U_1 et U_2 désignent les deux vitesses longitudinales de l'écoulement non perturbé. On a bien sûr supposé que $U_1 > U_2$. Suivant une idée de Bogdanoff, la référence [44] donne d'abord une expression théorique de la vitesse U_c de convection des grandes structures cohérentes. L'idée permettant d'obtenir

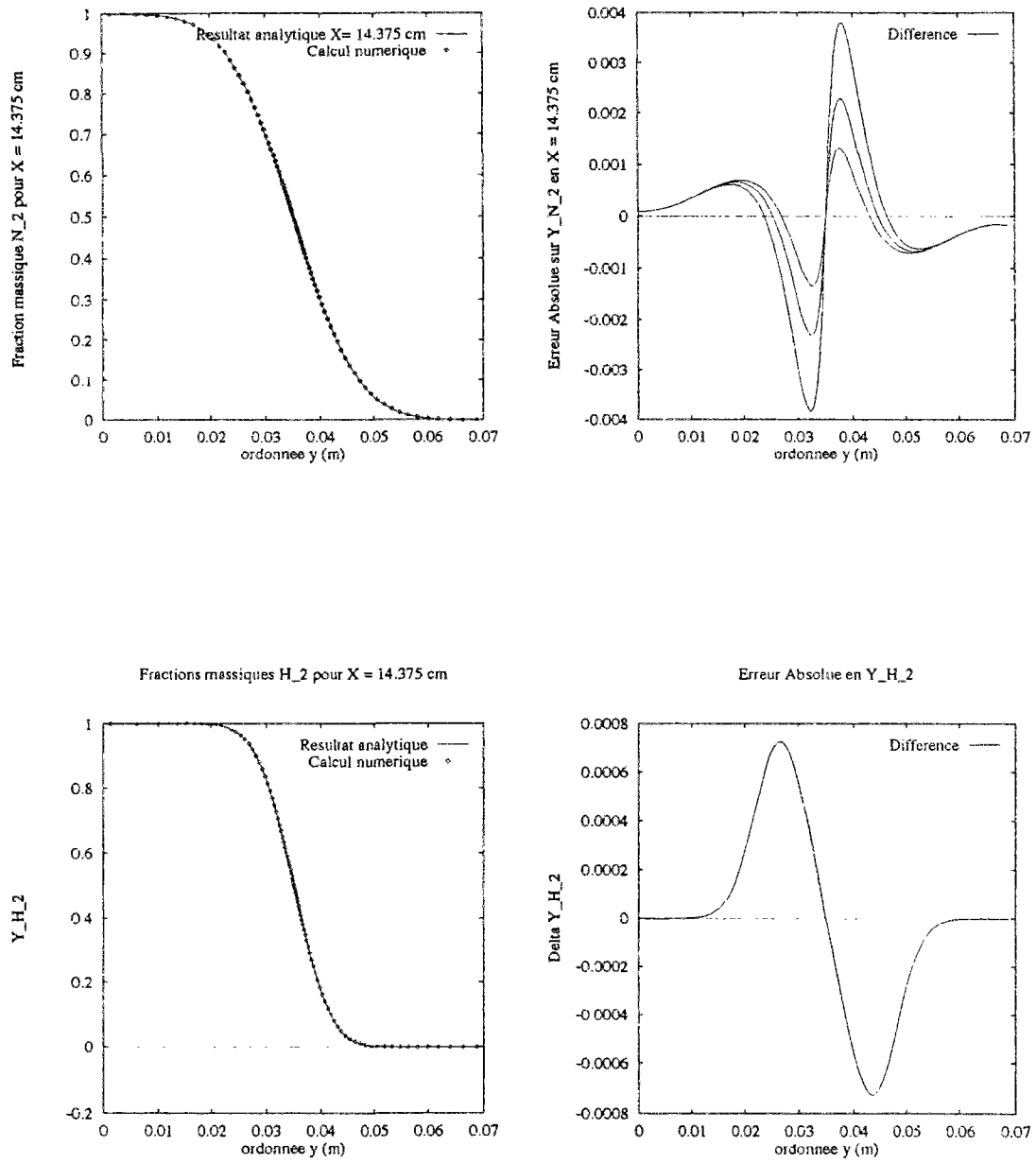


FIG. 6.7 - Couche de diffusion plane $N_2 - N_2$ et $H_2 - H_2$

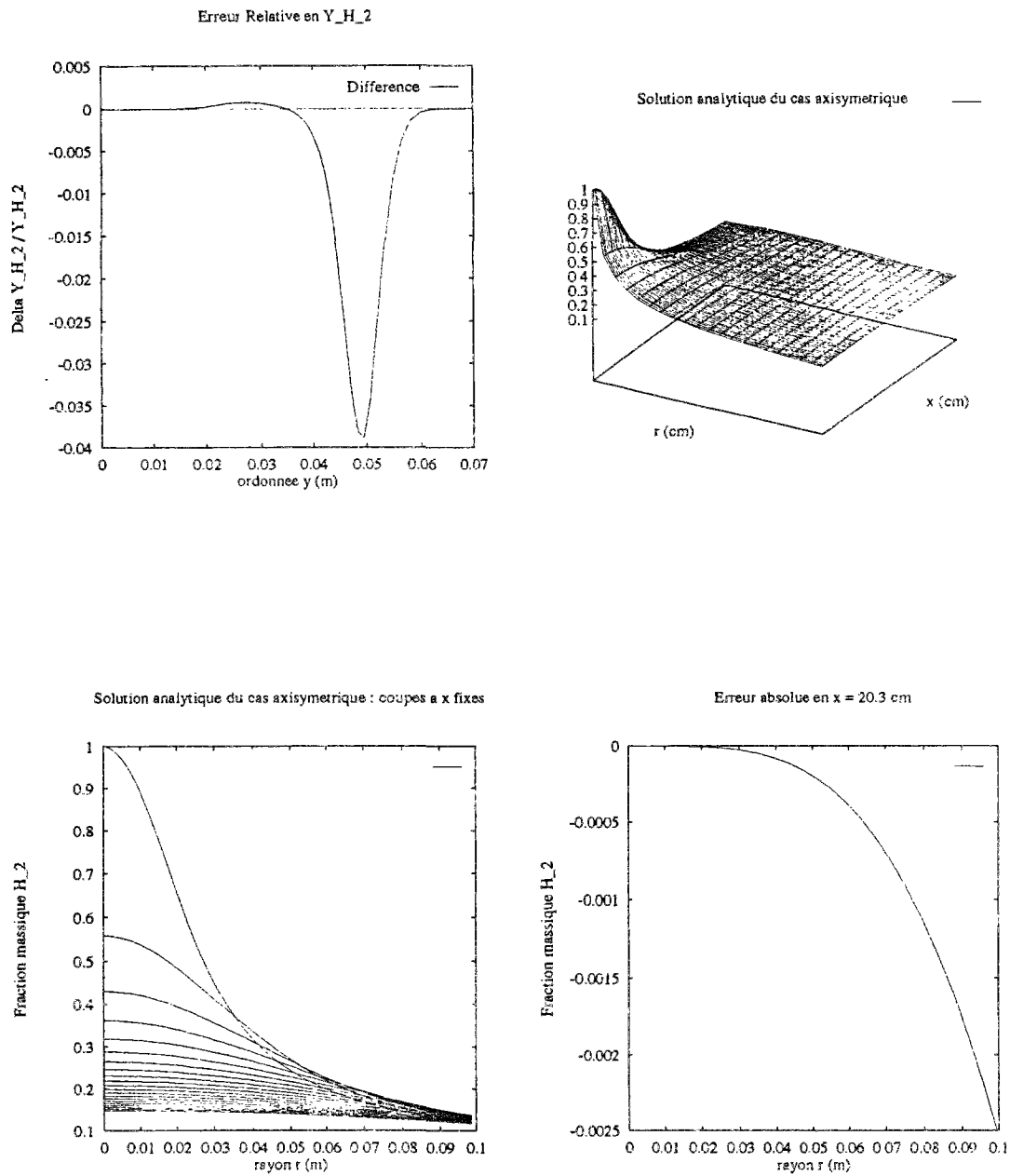


FIG. 6.8 - Couche de diffusion plane et axisymétrique

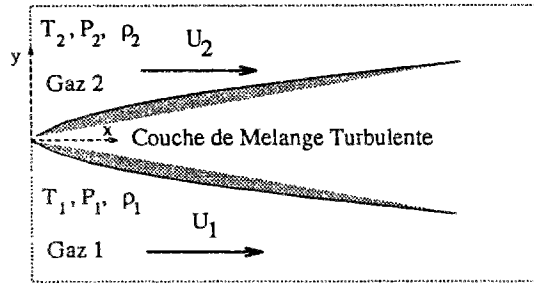


FIG. 6.9 - Couche de mélange

l'expression de U_c est qu'il existe un point d'arrêt au centre de ces structures cohérentes en forme de tourbillon, de telle sorte qu'en ce point les pressions totales de part et d'autre de la couche de mélange soient égales. Si l'on suppose en outre que le long des lignes de courant provenant de chaque côté de la couche, l'écoulement s'effectue à entropie constante, il vient alors l'égalité :

$$P_1 \times \left(1 + \frac{\gamma_1 - 1}{2} M_{c1}^2\right)^{\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1}} = P_2 \times \left(1 + \frac{\gamma_2 - 1}{2} M_{c2}^2\right)^{\frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1}} \quad (6.15)$$

où M_{c1} et M_{c2} sont les deux nombres de Mach convectifs de l'écoulement, définis selon :

$$\begin{cases} M_{c1} = \frac{U_1 - U_c}{c_1} \\ M_{c2} = \frac{U_c - U_2}{c_2} \end{cases} \quad (6.16)$$

où c_1 et c_2 désignent les vitesses du son dans chaque écoulement. La formule (6.15) montre que pour des nombres de Mach convectifs pas trop grand et des rapports γ_1 et γ_2 pas trop différents, $M_{c1} \simeq M_{c2}$. On déduit alors une expression pour U_c :

$$U_c = U_1 \frac{1 + \frac{U_2}{U_1} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}}{1 + \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}} \quad (6.17)$$

L'expression de U_c peut se simplifier lorsque $\gamma_1 = \gamma_2$, selon :

$$U_c = \frac{c_2 U_1 + c_1 U_2}{c_1 + c_2} \quad (6.18)$$

Les auteurs supposent alors, en accord avec leurs observations expérimentales, que le taux de croissance de l'épaisseur de couche de mélange, pour un écoulement incompressible, $\delta'_0 = d\delta_0/dx$ est proportionnel à la différence de vitesse $U_1 - U_2$ dans le référentiel lié aux structures cohérentes. Ils obtiennent l'expression désormais classique :

$$\delta'_0 = \frac{1}{2} C \frac{\left(1 - \frac{U_2}{U_1}\right) \left(1 + \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\right)}{1 + \frac{U_2}{U_1} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}} \quad (6.19)$$

Nous n'avons pas précisé ce que nous notons δ . Le paramètre δ désigne de façon générique une épaisseur de couche de mélange, liée aux grandeurs effectivement observées et aux moyens de mesure : épaisseur de Pitot liée aux variations de pression, épaisseur de concentration, ou épaisseur "visuelle" fondée sur les différences d'indice de réfraction. Lorsque l'écoulement devient auto-similaire toutes ces épaisseurs deviennent proportionnelles entre elles. La constante C est usuellement prise entre 0.165 et 0.181 pour l'épaisseur de vorticit  .

Lorsque l'on consid  re un   coulement compressible, les observations exp  rimentales permettent de constater que la croissance affine de l'  paisseur est toujours v  rifi  e mais que le taux d'accroissement est moindre lorsque M_{c1} augmente. Normalis   par le taux de croissance en incompressible ($M_{c1} = 0$), le taux de croissance pr  sente l'allure de la figure 6.10, tir  e de [44] citant [46] :

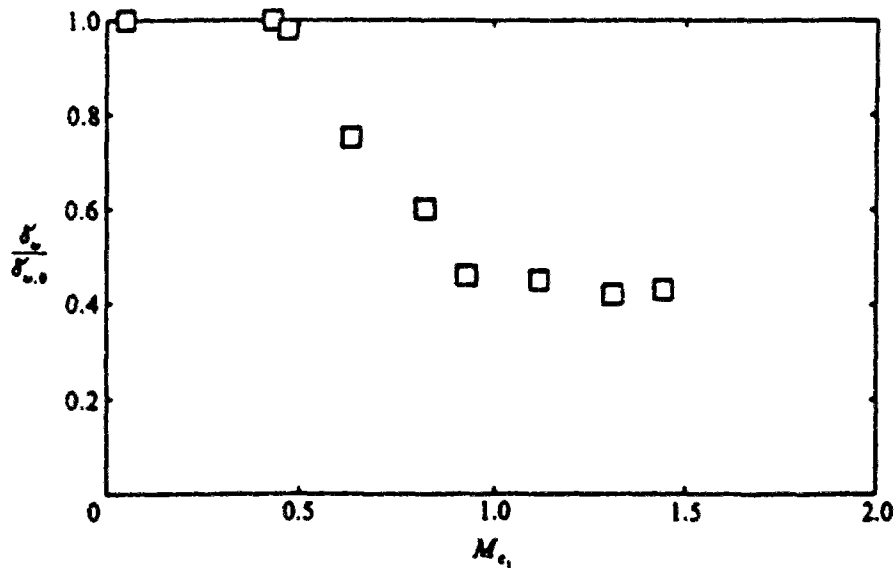


FIG. 6.10 - Taux de croissance normalis   pour un   coulement compressible

On d  duit que l'expression (6.19) demeure formellement valable pour δ' , mais la "constante" C est cette fois fonction du Mach convectif. On peut   crire $\delta' = f(M_{c1}) \times \delta'_0$.

Remarque 1 : Il convient de distinguer ici la diff  rence de comportement entre un   coulement o   la masse volumique n'est pas uniforme et un   coulement compressible. Pour un   coulement compressible, la diminution observ  e du taux de croissance lorsque M_{c1} augmente n'est pas due aux diff  rences de masse volumique entre les deux   coulements, mais plut  t    l'effet stabilisant de l'augmentation du Mach convectif.●

Dans [47] est pr  sent  e une compilation de r  sultats exp  rimentaux. Nous reproduisons sur la figure 6.11 la courbe, dite de Langley, donnant le taux de croissance normalis   en fonction

de M_{c1} .

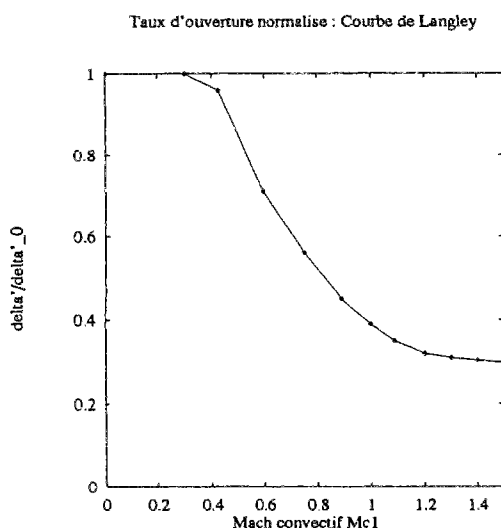


FIG. 6.11 - Courbe de Langley pour une couche de mélange compressible

6.3.2 Résultats numériques

Afin de valider le couplage entre les solveurs Navier-Stokes et $k - \epsilon$, nous avons ainsi calculé l'épaisseur de vorticit  pour des  coulements bidimensionnels plans compressibles, pour diff rentes valeurs du nombre de Mach convectif.

En gaz pur, et avec des masses volumiques initiales identiques, nous avons effectu s deux essais, correspondant   des nombres de Mach convectifs de 0.75 et 1.5. Un autre essai, correspondant au m lange air-hydrog ne, impliquant un rapport de masses volumiques initiales  lev , est men  dans la partie 7 sur la combustion turbulente. Ici, nous avons consid r  des jets parall les d'oxyg ne pur,   une temp rature de 300 K et une pression de 0.1 atm, ce qui correspond   une masse volumique uniforme de 0.13 kg.m^{-3} .

Pour $M_{c1} = 0.75$, nous avons choisi les nombres de Mach respectifs de chacun des jets  gaux   1.5 et 3.0, ce qui correspond   des vitesses de 989 et 494.5 m.s^{-1} . Le calcul a  t  men  sur un maillage plan rectangulaire, comportant 5551 n uds (61 en x et 91 en y), de dimension 376.7 mm sur 100 mm. La plus petite maille en x est de 6 mm, et on multiplie la taille en x par un facteur $1+1.17 \text{ e-}3$ d'une maille sur l'autre. La taille en y est uniforme. Les valeurs de k et ϵ sont fix es en entr e et sur les bords lat raux   des valeurs dimensionn es de 10^{-3} . Le nombre de Courant a progress  par pas de 5   chaque it ration jusqu'  la valeur de 150 pour le solveur Navier-Stokes. Pour les routines du $k-\epsilon$, on fixe les valeurs du nombre de Courant pour les 5 premi res it rations, puis une autre valeur pour les 5 suivantes, et une autre encore pour toutes les suivantes. Nous avons pris 2, 5 et 10 pour ces trois valeurs. Le r sidu L^2 est divis  par 20000 environ en 200 it rations implicites et 1448 s. CPU sur un IBM

RS 6000 540. La viscosité turbulente maximale vaut environ 300 fois la viscosité physique. Les 2/3 du temps CPU est employé pour résoudre les équations de la turbulence.

On porte sur la figure 6.12 l'épaisseur de la couche de vorticit , ainsi que la droite de pente th orique donn e par la courbe de Langley (nous avons trac  une courbe toutes les 40 it rations).

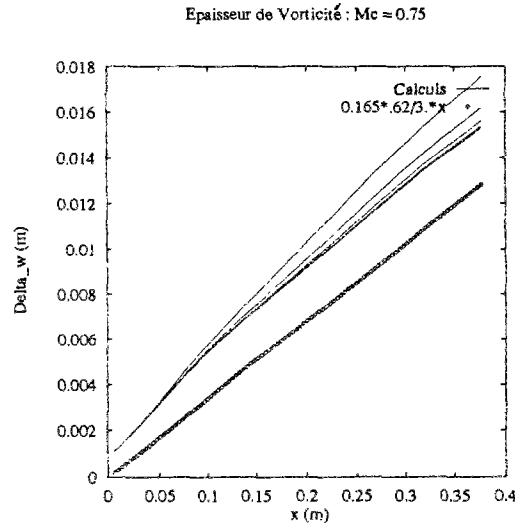


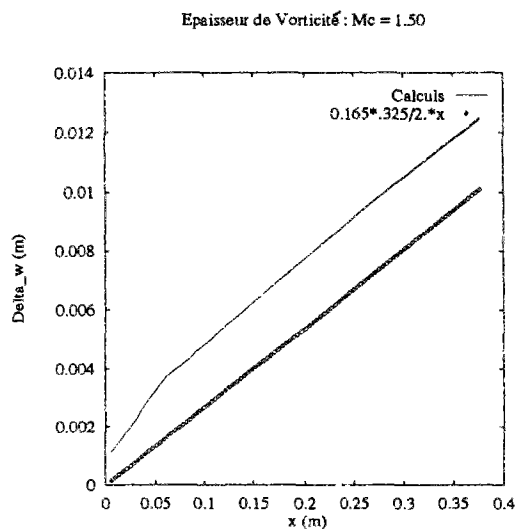
FIG. 6.12 - Evolution de l' paisseur de vorticit  $M_{c1} = 0.75$

Pour $M_{c1} = 1.50$, on ne change par rapport au cas pr c dent que les valeurs des deux nombres de Mach. On prend 1.5 et 4.5. Le nombre de Courant varie cette fois de 1   50 par pas de 1. Le r sidu est divis  par 10^5 environ en 300 it rations et 8100 s CPU. La diff rence de CPU avec les cas pr c dent s'explique par le temps plus important pass  dans les routines de turbulence : plus des 9/10 du CPU. Le r sultat est port  sur la figure 6.13.

On constate bien que les courbes $\delta_w(x)$ deviennent parall les   la droite th orique, en tenant compte du coefficient de correction donn  par les courbes 6.10 et 6.11.

Remarque 2 : On remarque que la valeur limite trouv e pour un grand nombre de Mach convectif est en sensible d saccord avec la courbe 6.10 repr sentant la compilation de Bogdanoff [46]. Notre r sultat   haut Mach convectif est plut t en accord avec la courbe de Langley. •

Remarque 3 : Cette validation num rique pour des couches de m lange compressibles a  t  effectu e sans correction compressible de type Sarkar ou Zeman (cf. chapitre pr c dent). Nous insistons sur le fait que nous obtenons tout de m me des r sultats en accord avec les observations exp rimentales pour les taux d'ouverture. Ce fait pourrait s'expliquer par le fait que l' ventuel effet des corrections compressibles num riques est n gligeable pour le type de calculs effectu s, ou bien encore que la m thode du deuxi me ordre employ e pour r soudre

FIG. 6.13 - Evolution de l'épaisseur de vorticité $Mc_1 = 1.5$

les équations du modèle $k - \epsilon$ semble s'avérer sensiblement moins diffusive que les méthodes usuellement employées. Si cette dernière hypothèse est vérifiée, cela signifierait que le modèle $k - \epsilon$ serait capable de reproduire le comportement du taux d'ouverture des couches de mélange compressibles à fort Mach convectif. Mais est-ce la bonne explication? •

6.4 Annexe

6.4.1 Solution analytique de la couche de diffusion plane

Le système (6.8) consiste à trouver $f(x, y)$ telle que :

$$\begin{cases} \alpha \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \text{ pour } x \in \mathbb{R}^{+*} \text{ et } y \in \mathbb{R} \\ f(x = 0^+, y) = \mathcal{I}_{r_0}(y) \text{ où } y \in \mathbb{R} \end{cases}$$

avec

$$\mathcal{I}_{r_0}(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } -r_0 \leq y \leq r_0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous allons supposer a priori que les transformations que nous allons effectuer sont licites et nous les justifierons a posteriori. Remarquons que x varie de 0 à $+\infty$ et effectuons alors une transformation de Laplace par rapport à la variable x . On note $\mathcal{L}f(s, y)$ la fonction ainsi obtenue.

La transformée de Laplace est définie, pour $z \in \mathcal{C}$, selon :

$$\mathcal{L}u(z) = \int_0^{+\infty} e^{-zt} u(t) dt$$

Il vient alors :

$$\alpha (s\mathcal{L}f(s, y) - f(0^+, y)) = \alpha (s\mathcal{L}f(s, y) - \mathcal{I}_{r_0}(y)) = \frac{\partial^2 \mathcal{L}f(s, y)}{\partial y^2}$$

Effectuons ensuite une seconde transformation, de Fourier cette fois, par rapport à la variable y . Notons $\hat{f}(s, p) := \mathcal{F}\mathcal{L}f(x, y)$ la fonction obtenue après ces deux transformations, avec :

$$\mathcal{F}u(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-izt} u(t) dt$$

En outre, puisque [48] :

$$\mathcal{F}(\mathcal{I}_{r_0}) = \frac{2 \sin(r_0 p)}{p}$$

il vient :

$$\alpha \left(s\hat{f}(s, p) - \frac{2 \sin(r_0 p)}{p} \right) = ((ip)^2 \hat{f}(s, p)) = -p^2 \hat{f}(s, p)$$

et

$$\hat{f}(s, p) = \frac{2\alpha \sin(r_0 p)}{p(\alpha s + p^2)}$$

Reste donc à transformer deux fois cette formule par Fourier inverse puis par Laplace inverse pour obtenir la fonction $f(x, y)$ répondant à la question. La transformée de Fourier inverse de cette expression s'écrit :

$$\mathcal{F}^{-1} \hat{f}(s, p) = \mathcal{L}f(s, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\alpha \sin(r_0 p)}{p(\alpha s + p^2)} e^{ipy} dp$$

ou encore :

$$\mathcal{L}f(s, y) = \frac{\alpha}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ir_0 p} - e^{-ir_0 p}}{p(\alpha s + p^2)} e^{ipy} dp$$

On est donc ramené au calcul d'une intégrale du type :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iKp}}{p(\alpha s + p^2)} dp$$

avec $K = r_0 + y$ ou $K = -r_0 + y$.

Une telle intégrale peut se déterminer par la méthode des résidus. Les pôles de la fonction méromorphe g :

$$z \longrightarrow g(z) = \frac{\exp iKz}{z(z^2 + \alpha s)}$$

sont simples si s est non nul et sont 0 et les racines carrées du nombre complexe $-\alpha s$.

Si l'on note $\rho e^{i\phi} = -\alpha s$ et $\rho \geq 0$, les racines de $-\alpha s$ sont $\sqrt{\rho} e^{i\frac{\phi}{2}}$ et $\sqrt{\rho} e^{-i\frac{\phi}{2}}$. Ces deux complexes sont donc situées de part et d'autre de l'axe des abscisses. Soit s_1 la racine de $-\alpha s$ telle que la partie imaginaire de s_1 soit positive ou nulle. Définissons alors le contour orienté Γ du plan complexe dessiné figure 6.14:

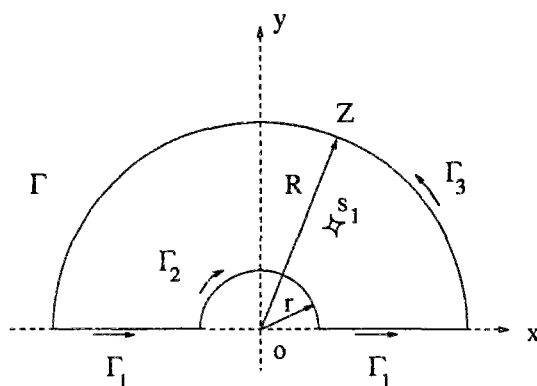


FIG. 6.14 - Contour d'intégration Γ

s_1 est alors la seule racine intérieure à Γ . On peut décomposer Γ en trois parties Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 . L'intégrale de la fonction complexe g définie plus haut peut ainsi se décomposer en trois intégrales sur chacune de ces trois parties.

Sur Γ_1 , z est réelle et l'intégrale sur cette partie tend, lorsque r tend vers zero et R tend vers plus l'infini, vers :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iKz}}{z(\alpha s + z^2)} dz$$

c'est-à-dire vers l'intégrale qui nous intéresse.

Calculs des intégrales sur Γ_2 et Γ_3

Sur Γ_2 et Γ_3 , z est de la forme :

$$z = \rho e^{i\theta}$$

avec $\rho = r$ ou R , $\rho \geq 0$, θ variant de π à 0 sur Γ_2 , et de 0 à π sur Γ_3 .

Soit, puisque :

$$dz = \rho i e^{i\theta} d\theta$$

il vient, pour $j = 2, 3$:

$$\int_{\Gamma_j} g(z) dz = \int_{\Gamma_j} i \frac{e^{iK(\rho e^{i\theta})}}{\rho^2 e^{2i\theta} + \alpha s} d\theta$$

Lorsque $\rho = r \rightarrow 0$:

$$\int_{\Gamma_2} g(z) dz = \int_{\pi}^0 \frac{i}{\alpha s} d\theta = -\frac{i\pi}{\alpha s}$$

Et lorsque $\rho = R \rightarrow +\infty$:

$$\left| \int_{\Gamma_3} g(z) dz \right| \leq \int_0^{\pi} \frac{e^{-KR \sin \theta}}{|R^2 - |\alpha s| |} d\theta$$

Entre 0 et π , le sinus prend des valeurs positives. En outre, R est positif. Supposons alors que K soit positif, i.e. que $y \geq r_0$. (Nous verrons plus loin que nous pourrions nous passer de cette hypothèse.) Alors, on a :

$$\left| \int_{\Gamma_3} g(z) dz \right| \leq \frac{\pi}{|R^2 - |\alpha s| |}$$

qui tend vers zero lorsque $R \rightarrow +\infty$.

Formule des résidus

On détermine d'abord le résidu en s_1 . On suppose que s est non nul, ce qui est licite, vue la formule de la transformée inverse de Laplace. Donc, puisque s_1 est simple :

$$\text{Res}(s_1) = \frac{e^{iKs_1}}{\alpha s - 3\alpha s} = -\frac{e^{iKs_1}}{2\alpha s}$$

et, après application de la formule des résidus, il vient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iKp}}{p(\alpha s + p^2)} dp = \frac{i\pi}{\alpha s} (1 - e^{iKs_1})$$

Ce qui donne finalement, tous calculs faits :

$$\mathcal{L}f(s, y) = \frac{\alpha}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ir_0 p} - e^{-ir_0 p}}{p(\alpha s + p^2)} e^{ipy} dp = \frac{e^{i(-r_0+y)s_1} - e^{i(r_0+y)s_1}}{2s}$$

avec $s_1^2 = -\alpha s$, $\text{Im}(s_1) \geq 0$ et $y > r_0$.

Si l'on note \sqrt{s} la racine carrée de s de partie réelle positive, on peut écrire :

$$s_1 = i \sqrt{\alpha} \sqrt{s}$$

et

$$e^{iKs_1} = e^{-K\sqrt{\alpha}\sqrt{s}}$$

avec $K > 0$ et $\operatorname{Re}(\sqrt{s}) \geq 0$.

Alors, d'après [49], il vient :

$$f(x, y) = \frac{1}{2} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{(y + r_0) \sqrt{\alpha}}{2 \sqrt{x}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{(y - r_0) \sqrt{\alpha}}{2 \sqrt{x}} \right) \right)$$

expression établie pour $x > 0$ et $y > r_0 > 0$.

Extension de la solution

En fait, la fonction d'erreur :

$$\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-t^2} dt$$

est définie sur \mathbb{R} entier. Sa dérivée vaut :

$$\frac{d}{du} \operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2}$$

Il est alors aisé de vérifier par un calcul algébrique de dérivées un peu long mais sans difficulté que, **pour tout réel** y et tout x strictement positif, la fonction $f(x, y)$ trouvée satisfait bien :

$$\alpha \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$$

On vérifie également que la condition aux limites :

$$f(x = 0^+, y) = \mathcal{I}_{r_0}(y)$$

est satisfaite lorsque x tend vers zéro par valeurs positives.

On peut en conclusion faire la remarque que la recherche de la solution du système ci-dessus { équation aux dérivées partielles + condition aux limites } nous a conduit à effectuer des transformations fonctionnelles qui ont réduit l'espace de définition de la fonction trouvée. L'extension de l'expression analytique ainsi déterminée à tout le domaine souhaité étant possible, cette restriction n'a alors plus d'effet.

6.4.2 Résolution analytique de la couche de diffusion axisymétrique

Obtention d'une équation différentielle ordinaire

Le changement de variable :

$$u = \frac{\sqrt{\alpha} y}{\sqrt{2} \sqrt{x}}$$

et la recherche de la fonction f sous la forme :

$$f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x}} g(u)$$

permettent d'aboutir à l'équation différentielle ordinaire en u :

$$\frac{d^2g}{du^2} + \frac{dg}{du}(u + u^{-1}) + g = 0$$

Résolution de l'équation différentielle ordinaire

Si l'on effectue le deuxième changement de variable :

$$z = \frac{u^2}{4}$$

on obtient une autre équation différentielle ordinaire en $h(z) = g(u)$ qui s'écrit :

$$z \frac{d^2h}{dz^2} + \frac{dh}{dz}(2z + 1) + h = 0$$

La recherche de $h(z)$ sous la forme :

$$h(z) = e^{-z} w(z)$$

fournit une dernière équation en $w(z)$ sous la forme :

$$z \frac{d^2w}{dz^2} + \frac{dw}{dz} - zw = 0$$

Or, les solutions de cette E.D.O. peuvent être trouvées dans [50]. Les solutions sont de la forme :

$$w(z) = A I_0(z) + B K_0(z)$$

où I_0 et K_0 désignent les fonctions de Bessel modifiées d'ordre nul, A et B sont deux réels.

Solution de l'équation aux dérivées partielles

Les solutions de l'équation :

$$\alpha \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

peuvent donc se mettre sous la forme :

$$f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x}} e^{\frac{-\alpha y^2}{8x}} \left(A I_0\left(\frac{\alpha y^2}{8x}\right) + B K_0\left(\frac{\alpha y^2}{8x}\right) \right)$$

où les réels A et B sont constants par intervalle en $\frac{\alpha y^2}{8x}$.

Le fait que la condition aux limites est discontinue ne permet pas de trouver la solution de l'équation aux dérivées partielles sous la forme analytique particulière ci-dessus. Lorsque y tend vers 0, la forme limite de K_0 est [51] :

$$K_0(z) \simeq -\ln z$$

On en déduit que, dans ces conditions, B est nul . On sait alors approcher $I_0(z)$ par intervalles par des expressions analytiques élémentaires [52]. Si l'on impose $f(x_0, 0) = 1$, il vient :

$$f(x, y) = \frac{\sqrt{x_0}}{\sqrt{x}} e^{\frac{-\alpha y^2}{8x}} I_0\left(\frac{\alpha y^2}{8x}\right) .$$

Chapitre 7

Couche de mélange turbulente réactive

7.1 Introduction

Si l'on écarte l'approche par Simulation Numérique Directe, la modélisation des écoulements turbulents réactifs constitue un problème complexe, dont la solution est loin d'être unique. En effet, et avant toute modélisation spécifique, on devine le rôle essentiel de la prédiction du mélange turbulent (i.e. la façon dont les paquets de fluides se mélangent). D'autre part, il semble également important de connaître la façon dont s'effectue la diffusion turbulente de la chaleur et de la masse. Le modèle que nous utilisons pour accéder aux caractéristiques du mélange turbulent est l'approche par analyse statistique présentée au chapitre 5.

Un autre problème, plus essentiellement lié à la combustion turbulente, réside dans l'estimation des termes sources chimiques moyens. En effet, la forte non-linéarité de ces derniers empêche d'accéder à leurs valeurs moyennes directement à partir des grandeurs moyennes (température et concentrations) de l'écoulement. L'identification des termes sources chimiques moyens simplement en fonction des grandeurs moyennes de l'écoulement peut parfois conduire à des erreurs très importantes, en particulier lors de l'estimation des distances d'allumage dans une couche de mélange.

Pour cette difficulté spécifique, plusieurs approches ont été proposées. Dans [53], le modèle proposé consiste à supposer que localement, la flamme conserve la structure organisée d'une flamme laminaire. Cette "flammelette cohérente" est étirée et convectée par les tourbillons turbulents. On peut alors définir une densité de surface de flamme Σ et écrire une équation d'advection-diffusion avec terme source régissant l'évolution de Σ . Le terme source comporte usuellement un terme de production par étirement, et un terme de destruction par coalescence. Les taux de réactions moyens $\widetilde{\Omega}_k$ se déduisent comme produit de cette surface de flamme par un taux de réaction "laminaire surfacique" Ω_k^{LS} . Le problème se ramène ainsi à savoir estimer

ce terme Ω_k^{LS} en fonction de certaines grandeurs moyennes de l'écoulement, typiquement la température, la courbure et l'étirement locaux [54].

Une autre approche peut consister en l'introduction d'une ou plusieurs fonctions densités de probabilités et d'exprimer alors les grandeurs utiles comme moments de ces "Pdf". On pourra se reporter à [55] pour une comparaison de deux modèles reliés à chacune des ces deux approches.

L'influence des fluctuations de température sur le taux de réaction demeure certainement un des phénomènes importants à prendre en compte. Aussi, pour les applications envisagées, il nous est apparu préférable d'adopter dans un premier temps une approche par fonction de densité de probabilité présumée sur la température seulement. Cette approche présente l'avantage d'être relativement simple, et de permettre l'incorporation dans le modèle de combustion turbulente de la connaissance acquise par ailleurs des fluctuations du champ fluide, à partir du modèle de turbulence ou de mesures expérimentales. Cependant, elle ne peut certainement pas prétendre être générale. En particulier, elle est inadéquate lorsque les corrélations entre les fluctuations des concentrations et de température jouent un rôle significatif.

7.2 Moyenne statistique du terme source chimique

7.2.1 Densité de probabilité en température et concentrations

Ainsi qu'il a été indiqué au chapitre 5, pour définir la moyenne de Favre d'une grandeur ϕ , on utilise une densité de probabilité pondérée par la masse volumique selon :

$$\tilde{P}(\phi) = \frac{1}{\rho} \int_0^\infty \rho \check{P}(\rho, \phi) d\rho \quad (7.1)$$

où $\check{P}(\rho, \phi)$ désigne la densité de probabilité conjointe de ϕ et ρ . La moyenne de Favre $\tilde{\phi}$ de ϕ est égale à :

$$\tilde{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \tilde{P}(\phi) d\phi \quad (7.2)$$

Si la grandeur ϕ est une fonction de variables $X \in \mathbb{R}^n$, on peut formellement remplacer l'expression (7.2) de $\tilde{\phi}$ par

$$\tilde{\phi} = \int_{D_X} \phi(X) \mathcal{P}(X) dX \quad (7.3)$$

où D_X désigne le domaine de \mathbb{R}^n de variation possible pour X et $\mathcal{P} = (\tilde{P} \circ \phi)\phi_{,X}$.

Reprenons maintenant le modèle de cinétique chimique décrit au chapitre 3 et dont nous ne rappelons pas les notations.

Pour ϕ identiquement égal au terme source chimique $\Omega_m(T, \mathbf{c})$ pour l'espèce m , dépendant de la température T et du vecteur \mathbf{c} des concentrations c_k des espèces chimiques, (7.3) devient :

$$\Omega_m(\widetilde{T}, \mathbf{c}) = \int_0^{+\infty} \dots \int_0^{+\infty} \Omega_m(T, \mathbf{c}) \mathcal{P}(T, \mathbf{c}) dT d\mathbf{c} \quad (7.4)$$

avec $d\mathbf{c} = \prod_{k=1}^{\kappa} dc_k$.

Certains auteurs [56, 57] essaient d'écrire une équation de bilan pour $\mathcal{P}(T, \mathbf{c})$, ou plus généralement pour $\mathcal{P}(X)$, où X désigne le vecteur des variables dites caractéristiques, à partir desquelles sont exprimées les grandeurs à moyenner.

7.2.2 Densités de probabilité présumées

Dans notre approche, nous supposons que l'effet prépondérant agissant sur la moyenne du terme source est la fluctuation de température. Nous négligeons ainsi les fluctuations en concentrations et la fonction $\mathcal{P}(T, \mathbf{c})$ peut alors se décomposer comme suit :

$$\mathcal{P}(T, \mathbf{c}) = \mathcal{T}(T) \prod_{k=1}^{\kappa} \delta(c_k - \tilde{c}_k) \quad (7.5)$$

où δ est la masse de Dirac en 0, et $\mathcal{T}(T)$ désigne la fonction densité de probabilité en température. Si l'on explicite $\Omega_m(T, \mathbf{c})$, il vient :

$$\Omega_m(\widetilde{T}, \mathbf{c}) = \sum_{i=1}^I W_k \nu_{ki} \left(\widetilde{K}_{f,i} \prod_{k=1}^{\kappa} \tilde{c}_k^{\nu'_{ki}} - \widetilde{K}_{r,i} \prod_{k=1}^{\kappa} \tilde{c}_k^{\nu''_{ki}} \right), \quad (7.6)$$

avec

$$\widetilde{K}_{f,i} = \int_0^{+\infty} K_{f,i} \mathcal{T}(T) dT \quad ; \quad \widetilde{K}_{b,i} = \int_0^{+\infty} K_{b,i} \mathcal{T}(T) dT \quad (7.7)$$

Le modèle par "assumed Pdf" consiste à se donner a priori une forme pour $\mathcal{T}(T)$. Les plus répandues et couramment utilisées sont alors la loi normale de Gauss et la β -fonction. La loi de Gauss s'écrit selon :

$$\mathcal{T}_{Gauss}(T) = (2\pi\sigma_T^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{T - \widetilde{T}}{2\sigma_T^2} \right] \quad (7.8)$$

où σ_T désigne l'écart-type de la fonction, racine carrée de la variance $\widetilde{T''T''}$. L'intervalle de variation en température n'étant pas infini, l'intervalle d'intégration devra nécessairement être tronqué, à la fois pour des raisons théoriques et de détermination numérique de l'intégrale. En outre, elle est peu flexible et ne permet pas de tenir compte d'une éventuelle asymétrie dans la répartition de température.

La β -fonction a une forme analytique plus complexe. Pour θ variant entre 0 et 1, elle s'exprime selon :

$$\beta(\theta) = \Psi(a, b) \theta^{a-1} (1 - \theta)^{b-1} \quad (7.9)$$

avec $\Psi(a, b) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}$. Γ désigne la fonction gamma, et a et b sont deux paramètres. Dans notre cas, la variable θ désigne la température réduite :

$$\theta = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}} \quad (7.10)$$

où T_{max} et T_{min} sont des températures maximale et minimale à préciser. La moyenne $\tilde{\theta}$ de θ vaut tout simplement:

$$\tilde{\theta} = \frac{\tilde{T} - T_{min}}{T_{max} - T_{min}} \quad (7.11)$$

Les paramètres a et b sont alors donnés par :

$$a = \tilde{\theta} \left(\frac{\tilde{\theta}(1 - \tilde{\theta})}{\sigma^2} - 1 \right) \quad \text{et} \quad b = (1 - \tilde{\theta}) \left(\frac{\tilde{\theta}(1 - \tilde{\theta})}{\sigma^2} - 1 \right) \quad (7.12)$$

σ^2 désigne ici la variance réduite :

$$\sigma^2 := \widetilde{\theta''\theta''} = \frac{\widetilde{T''T''}}{(T_{max} - T_{min})^2} \quad (7.13)$$

La fonction β est ainsi complètement déterminée par la donnée de $\widetilde{T''T''}$, \tilde{T} , T_{max} et T_{min} . La température moyenne \tilde{T} est directement fournie par le code de résolution, $\widetilde{T''T''}$ nécessite un modèle supplémentaire que nous examinerons par la suite. T_{max} et T_{min} ne sont hélas pas connues. Plutôt que d'utiliser le max et le min des températures dans l'écoulement [58], nous les fixons par rapport à la température moyenne et à l'écart-type selon :

$$\begin{cases} T_{min} = \tilde{T} - \phi_1 \sqrt{\widetilde{T''T''}} \\ T_{max} = \tilde{T} + \phi_2 \sqrt{\widetilde{T''T''}} \end{cases} \quad (7.14)$$

ϕ_1 et ϕ_2 sont deux réels positifs.

7.2.3 Equation pour la variance

A partir de l'équation de conservation de l'énergie, il est possible d'écrire une équation de bilan moyennée pour l'enthalpie ou l'énergie interne du fluide. On peut alors déduire un terme de corrélation du type $\widetilde{G''G''}$, où G désigne l'enthalpie ou l'énergie interne du mélange. la variance en température se déduit selon :

$$\widetilde{T''T''} = \frac{\widetilde{G''G''}}{C(\tilde{T})} \quad (7.15)$$

avec $C(\tilde{T})$ pseudo-capacité calorifique, définie selon :

$$C(\tilde{T}) = \frac{\int_{T_0}^{\tilde{T}} c(\theta) d\theta}{\tilde{T}} \quad (7.16)$$

où c désigne la capacité calorifique moyenne, à pression ou volume constant suivant que G désigne l'enthalpie ou l'énergie interne du mélange.

Pour une première approche, l'introduction d'une variable turbulente supplémentaire, nécessitant l'écriture et la résolution de telles équations, peut s'avérer longue et coûteuse. Dans un premier temps, nous préférons donc simplement calculer la variance en température par une équation de gradient [59]:

$$\widetilde{T''T''} = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon \text{Pr}_t} \left[\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right]^2 \quad (7.17)$$

où les variables et constantes intervenant dans cette expression ont déjà été définies. Cette approche très sommaire se situe juste au dessus de l'approche consistant à fixer l'écart-type comme une fraction constante de la température moyenne [60].

7.3 Intégration numérique

L'évaluation des termes sources coûte relativement cher en temps de calcul. Si l'on désire que l'intégration numérique des expressions soit suffisamment précise, cela peut requérir en chaque point plusieurs (jusqu'à une douzaine) évaluations des termes sources. Afin de limiter le nombre d'évaluation requises, nous menons au préalable une étude paramétrique pour les formules de quadrature que nous allons utiliser.

7.3.1 Formules de Gauss

De façon générale, les formules d'intégration numérique sont de la forme :

$$\int_0^1 \mu(t) f(t) dt = \sum_{j=0}^N A_j^N f(t_j^N) \quad (7.18)$$

où $\mu(t)f(t)$ est la fonction à intégrer. Les points t_j^N sont appelés points d'intégrations et les coefficients A_j^N sont attachés à ces points. Si la fonction poids μ est strictement positive et continue, on sait que la formule (7.18) peut être exacte sur l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à $2N + 1$. Il existe alors un unique polynôme $v_N(t)$ de degré $N + 1$ dont les racines t_j^N - distinctes - sont égales aux points d'intégrations. La suite des polynômes v_N se construit par récurrence selon

$$\left\{ \begin{array}{l} v_0(t) = 1 \\ v_{N+1}(t) = t^{N+1} + \sum_{j=0}^N a_j^N v_j \\ a_j^N = \frac{\int_0^1 \mu(t) t^{N+1} v_j(t) dt}{\int_0^1 \mu(t) v_j^2(t) dt} \end{array} \right. \quad (7.19)$$

Les coefficients A_j^N sont positifs et se déduisent alors selon :

$$A_j^N = \int_0^1 \mu(t) \left(\frac{v_N(t)}{v'_N(t_j^N)(t - t_j^N)} \right)^2 dt \quad (7.20)$$

Lorsque la fonction poids est égale à 1, les polynômes $v_N(t)$ sont les polynômes orthogonaux de Legendre. Les racines des ces polynômes et les coefficients A_j^N sont évidemment tabulés [61].

Nous avons d'abord essayé d'effectuer quelques tests préliminaires relatifs à la précision numérique pouvant être obtenue à partir des formules d'intégration. Nous nous fixons une température d'activation T_a , un exposant γ du facteur pré-exponentiel, une valeur σ_T de l'écart-type en température, des valeurs de ϕ_1 et ϕ_2 , et une température moyenne \tilde{T} . A l'aide de formules de Gauss, nous déterminons ensuite les valeurs de l'intégrale \mathcal{I} :

$$\mathcal{I}(T_a, \gamma, \sigma_T, \phi_1, \phi_2, \tilde{T}) = \frac{1}{T_{max} - T_{min}} \int_{\tilde{T} - \phi_1 \sigma_T}^{\tilde{T} + \phi_2 \sigma_T} T^\gamma B(T) \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) dT \quad (7.21)$$

où $B(T) \equiv \beta(\theta)$. Nous déterminons également de façon numérique la valeur "exacte" de \mathcal{I} à l'aide d'une formule des trapèzes à 5000 points.

7.3.2 Etude paramétrique et comparaisons

Nous avons comparé les résultats obtenus avec les formules de Gauss pour $\mu \equiv 1$ et $\mu \equiv B$. Le but est d'estimer de manière suffisamment précise l'intégrale requise, avec un minimum d'évaluations de la fonction à intégrer.

Nous nous sommes placés dans deux cas :

- a) $T_a = 50000$ K et $\gamma = 1.5$,
- b) $T_a = 10000$ K et $\gamma = 0.5$.

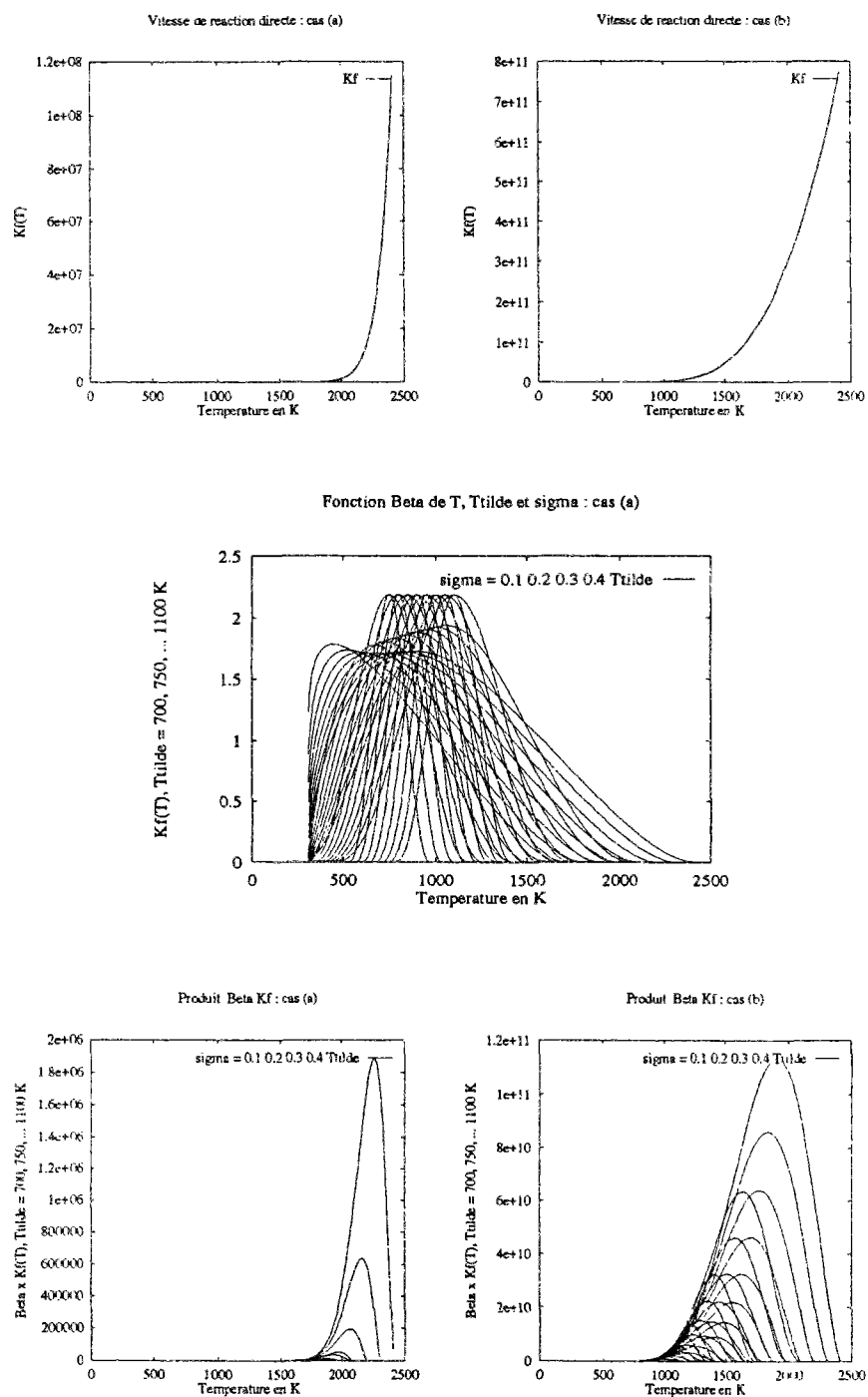
Le cas (a), avec une forte énergie d'activation, correspond à une réaction violente, le cas (b) à une réaction nettement plus progressive. Dans chaque cas, nous prendrons $\phi_1 = \phi_2 = \phi = 3$ et les valeurs de $\frac{\sigma_T}{\tilde{T}}$ seront successivement égales à 0.1, 0.2, 0.3 et 0.4. La température moyenne varie de 700 à 2500 K. En pratique, la température sera astreinte à demeurer comprise entre 300 et 3500 K, et le rapport $\frac{\sigma_T}{\tilde{T}}$ ne devra pas dépasser 0.4.

Si l'on trace les courbes $\tilde{K}_{f,i}(T)$, $B(T)$ et $B(T) \times K_{f,i}(T)$, figure 7.1, on remarque que le produit des deux fonctions conserve l'allure en cloche de $B(T)$, mais est décalé vers les températures croissantes. Cette remarque nous a conduit à essayer d'omettre les premiers points d'intégration lors de l'évaluation de la somme.

Nous avons envisagé les formules générales à 2, 3, 6, 8, 10 et 12 points, puis des formules correspondant à $\mu \equiv B$ à 2, 3 et 4 points. Les résultats pour les formules générales sont montrés figures 7.2 et 7.3. Les pics correspondent en fait à des valeurs exactes de l'intégrale, et un logarithme de l'erreur relative qui tend vers $-\infty$. La figure 7.4 condense les résultats obtenus pour les formules d'intégration de Gauss, pondérées par la fonction β . Les approximations sont d'autant moins bonnes que l'intervalle d'intégration, et donc le σ_T , sont importants.

A partir de ces courbes, on peut faire les remarques suivantes :

- les formules à 2 et 3 points sont à écarter pour les deux températures d'activation,
- la correction apportée par les premiers termes est parfois négligeable, mais pas toujours,
- pour un fort écart type, les formules générales peuvent entraîner une erreur importante lorsque la température moyenne est élevée, même pour les formules à 10 et 12 points,

FIG. 7.1 - Vitesse de réaction, fonction β et produit : cas (a) et (b)

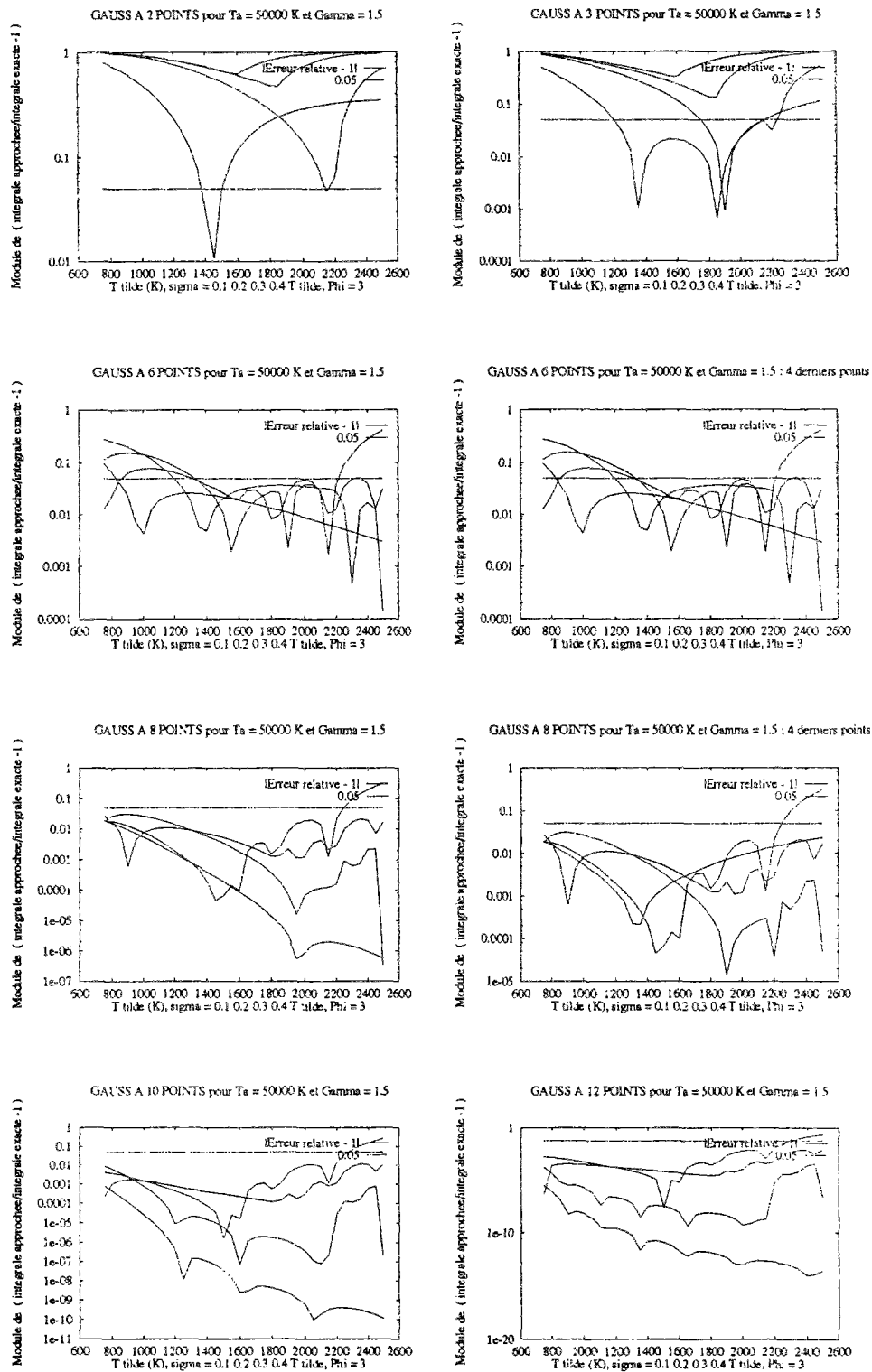


FIG. 7.2 - Formules d'intégration de Gauss générales : cas (a)

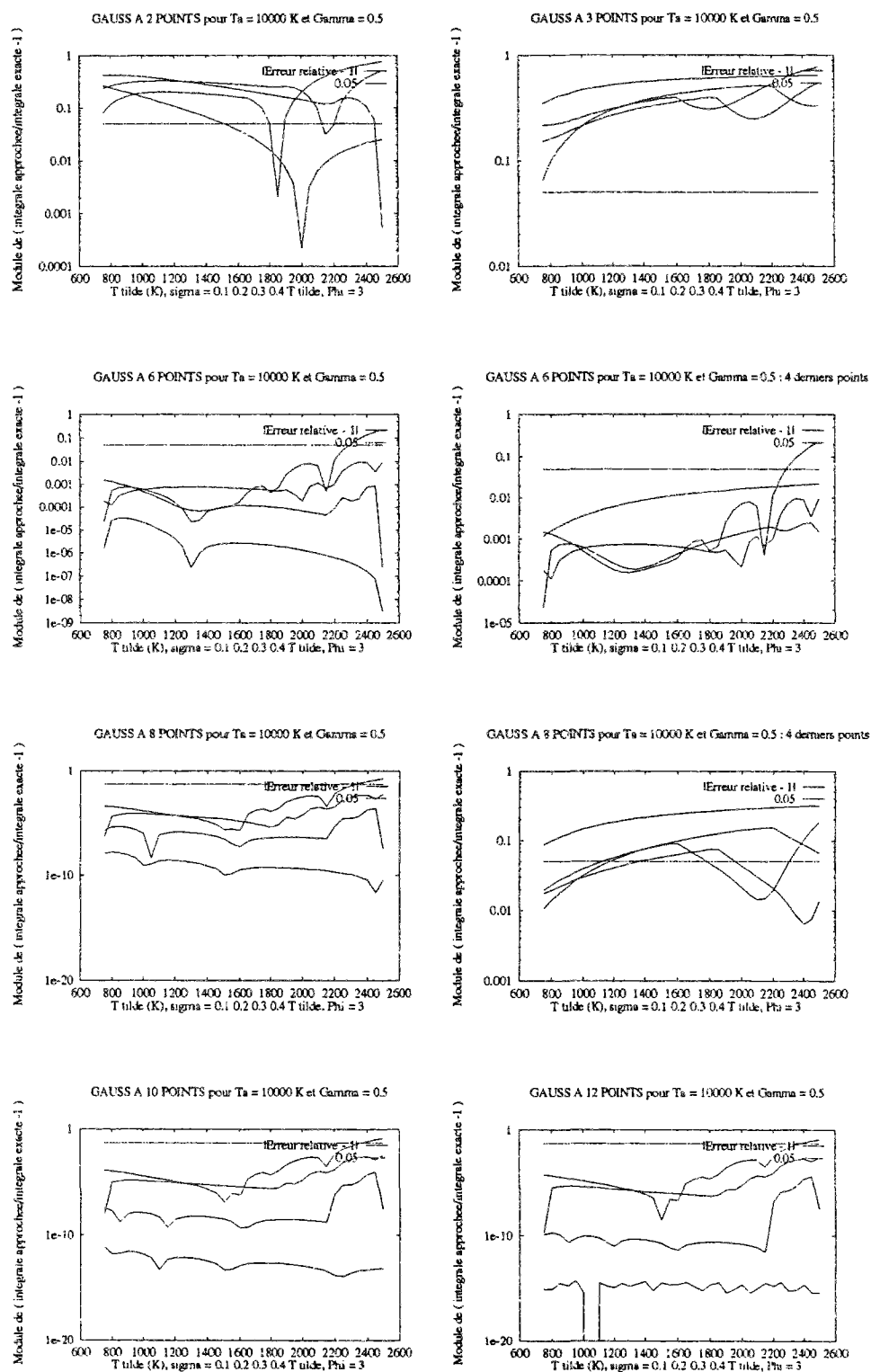


FIG. 7.3 - Formules d'intégration de Gauss générales : cas (b)

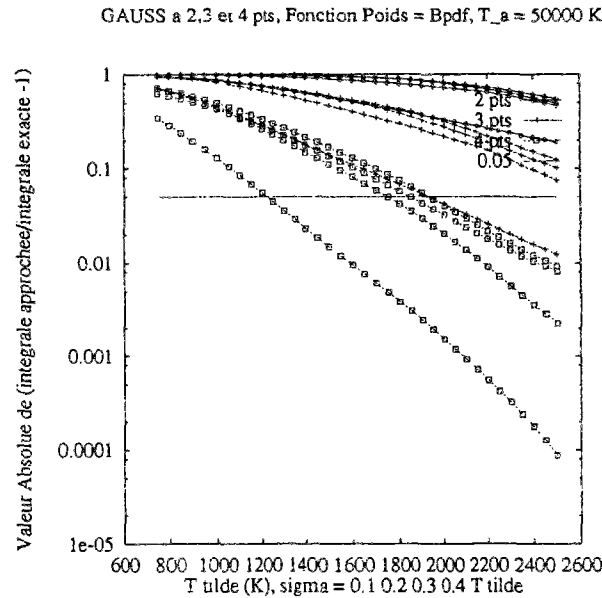


FIG. 7.4 - Formules d'intégration de Gauss, pondérées par β : cas (a)

- par contre, les formules pondérées par B ont un meilleur comportement à haute température.

Après ces quelques remarques, on convient d'adopter le compromis suivant :

- pour une réaction à faible énergie d'activation, en dessous de 2000 K pour un écart type trop important ($\sigma_T/\tilde{T} > 0.35$), on utilisera la formule générale de Gauss à 6 points, en omettant les deux premiers points d'intégration,
- pour une réaction à forte énergie d'activation, en dessous de 2000 K lorsque $\sigma_T/\tilde{T} > 0.35$, on utilisera une formule de Gauss générale à 10 points, en omettant encore les deux premiers points d'intégration,
- au dessus de 2000 K pour \tilde{T} et lorsque $\sigma_T/\tilde{T} > 0.35$, on utilisera dans ce cas la formule de Gauss pondérée par B à 4 points.

Il convient de noter que la fonction B n'est pas un poids optimal, en ce sens que, vue sa symétrie, elle ne tient pas compte du décalage vers les températures élevées de la "cloche" $B(T) \times K_{f,i}(T)$. Sous nos hypothèses, l'expression pour $B(T)$ peut se simplifier et devenir indépendante de \tilde{T} . En effet, d'après les expressions de T_{min} et T_{max} , il vient que :

$$\tilde{\theta} = \frac{\phi_1}{\phi_1 + \phi_2} = \text{cte}, \text{ et } \sigma = \frac{1}{\phi_1 + \phi_2} = \text{cte}. \quad (7.22)$$

Cependant, il peut arriver, lorsque \tilde{T} est trop haute ou trop basse, que T_{min} ou T_{max} sorte de l'intervalle de températures "physiques" [300 ; 3500], et efface les propriétés (7.22). On peut

alors diminuer ϕ_1 et ϕ_2 à des valeurs convenues a priori (et en pratique égales à 1) pour rester dans l'intervalle et conserver les propriétés (7.22). Les points et les coefficients d'intégrations pour la formule pondérée par B sont alors modifiés.

7.4 Couche de mélange turbulente réactive

Le point essentiel de la simulation de l'allumage dans une couche de mélange est la prédiction correcte de la distance d'allumage. Certains auteurs [62] ont constaté que le choix du paramètre ϕ pouvait influencer cette distance. Toutefois, dans le cas de la combustion air-hydrogène, ces auteurs ont constaté que lorsque ϕ était supérieur ou égal à 2.5-3, cette influence s'estompe. La limitation $\phi = 1$ n'intervient dans notre cas qu'à haute température, et n'influe donc pas sur l'allumage.

7.4.1 Calcul préalable non réactif

L'écoulement étudié dans cette section est bidimensionnel plan. Il correspond au cas décrit dans [62]. On considère deux jets parallèles d'air et d'hydrogène, sous une atmosphère et 1000 K. La vitesse de l'air est de 1200 m.s^{-1} , celle de l'hydrogène est de 3800 m.s^{-1} . Les dimensions du domaine de calcul sont $276 \times 200 \text{ mm}$, pour 61×91 points. En x , les mailles sont uniformément espacées. En y , la plus petite maille est de $980 \mu\text{m}$, au milieu et croît ensuite linéairement vers les bords supérieur et inférieur. Le modèle de combustion air-hydrogène comporte 9 espèces chimiques et 22 réactions réversibles. Au préalable, comme déjà indiqué dans le chapitre 6, nous effectuons un calcul sans faire intervenir de réaction chimique. On espère ainsi valider le comportement du code de résolution en présence d'un fort gradient initial de masse volumique. On constate que la croissance de l'épaisseur de vorticit  est en tr s bon accord avec la th orie, comme le montre la figure 7.6. Le nombre de Mach convectif est dans ce cas  gal   0.86, le coefficient correcteur de compressibilit  de 0.55. Le rapport initial $\frac{\left(1 - \frac{U_2}{U_1}\right) \left(1 + \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\right)}{1 + \frac{U_2}{U_1} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}}$ est ici  gal   1.49. Nous avons effectu s 350 it rations, avec un nombre de Courant variant de 1   50. On porte les  paisseurs de vorticit  obtenues chaque 50 it rations sur la figure 7.6, et l'on peut constater un tr s bon accord entre le calcul et le r sultat pr vu.

7.4.2 Effet du maillage sur l'allumage

Lorsque nous avons essay  d'enflammer le m lange, en premier lieu en ne prenant pas en compte les effets des fluctuations turbulentes, c'est- -dire avec les termes sources calcul es   partir de la temp rature moyenne, nous avons pu constater un fort effet de maillage, qui n'a pas  t  mis en  vidence dans [62]. Outre le maillage d crit dans le paragraphe pr c dent, que nous

appellerons “grossier” dans la suite, nous avons effectués des calculs sur deux autres maillages similaires de même dimensions. Seules les nombres de points et la taille de la plus petite maille en y varient. Le premier maillage comporte 61×181 nœuds, et une taille minimale en y de $24.4 \mu\text{m}$. Il est désigné comme “intermédiaire”. Le dernier est constitué de 81×301 points et la taille minimale en y est de $5 \mu\text{m}$; c’est le maillage “fin”. Des isovaleurs de températures et de fractions massiques du radical OH et d’eau, pour le cas où les termes sources sont “laminaires”, sont portés figures 7.7 à 7.11. On constate que l’allumage s’effectue nettement plus tôt lorsque le maillage est plus fin, et que les résultats entre maillage intermédiaire et maillage fin sont très proches. La solution du maillage grossier apparait donc comme erronée et à écarter. Dans le cas de [62], la longueur de l’allumage prévue est de 15 cm en “laminaire”. Le modèle de combustion utilisé est différent et comporte 7 espèces pour 7 réactions. Le domaine de calcul fait 5×20 cm et le maillage comporte 101×101 points. La plus petite maille en y n’est pas précisée et l’on peut supposer que le maillage est régulier. Pour le maillage “grossier”, l’allumage se situe environ à environ 20 cm, alors que pour les maillages “fins” et “intermédiaires”, il se situe respectivement à 8.2 et 9.2 cm.

7.4.3 Introduction de la Pdf

Nous avons introduit les effets de la fonction de densité de probabilité présumée en température sur le maillage “fin”. Le calcul montre un allumage à environ 6.2 cm, soit 2 cm avant l’allumage prédit sans tenir compte des fluctuations turbulentes. L’effet de la Pdf est donc comme attendu d’avancer l’époint d’allumage. Pour [62], l’allumage se situe à environ 5 cm. Le modèle de Pdf utilisé consiste également en une fonction de densité de probabilité en température, mais le calcul de l’écart-type est différent et procède de la résolution d’une équation supplémentaire, comme indiqué section 7.2.3. On porte les résultats sur les figures 7.12 à 7.15. Sont données successivement les iso-températures en K , les iso- Y_{OH} , les iso- $\text{Min}[\sigma_T; 0.4 \times \tilde{T}]$ initiaux en Kelvin, les iso- σ_T non limités en fin de calcul et en Kelvin. Cette dernière figure montre qu’il est absolument nécessaire de saturer l’écart-type et ainsi les limites du modèle en gradient de température pour σ_T .

7.5 Expérience de Burrows et Kurkov

L’expérience de combustion supersonique air-hydrogène de Burrows et Kurkov [63] constitue l’une des rares références expérimentales dans ce domaine. Elle consiste en une injection pariétale, longitudinale, sonique d’hydrogène pur dans un écoulement supersonique d’air partiellement brûlé, provenant d’une combustion préalable ayant pour but d’augmenter la température. On reproduit sur la figure 7.5 la configuration de l’expérience.

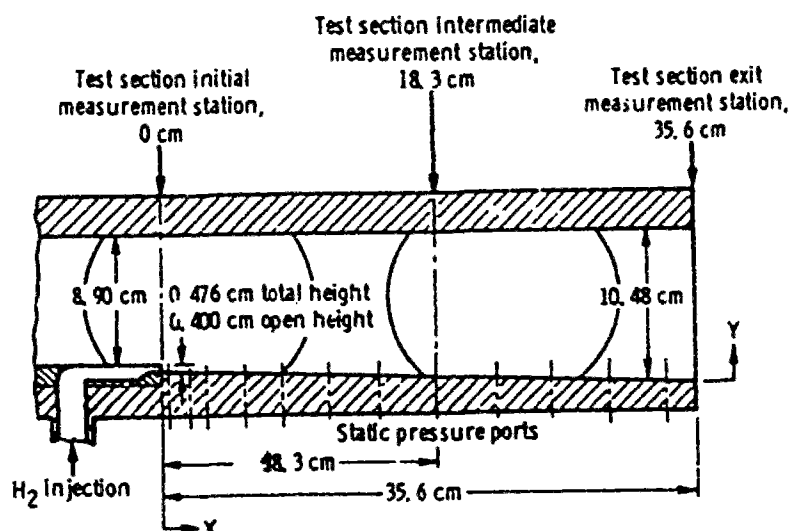


FIG. 7.5 - Configuration de l'expérience de Burrows et Kurkov

La divergence de l'écoulement ainsi étudié a pour but d'éviter le blocage thermique par augmentation de la pression. On porte sur le tableau ci-dessous les caractéristiques de chacun des deux écoulements :

	Jet de H_2	Air vicié
Nombre de Mach	1.00	2.44
Température (K)	254.	1270.
Vitesse (m/s)	1216.	1764.
Pression (atm)	1.	1.
Fractions massiques initiales		
H_2	1.	0.
O_2	0.	0.258
N_2	0.	0.486
H_2O	0.	0.256

La composition initiale de l'air vicié en espèces minoritaires n'étant pas précisée, l'air vicié a été supposé à l'équilibre. Le profil initial de vitesse et température dans l'air vicié tient compte de la couche limite d'épaisseur 2 cm, indiqué dans [63]. Par contre, on a négligé la couche limite dans l'injection d'hydrogène, ainsi que la petite zone de recirculation entre les deux jets.

Le maillage utilisé comporte 71×185 points, et la plus petite maille en y est de $5 \mu\text{m}$. Les mailles sont resserrées près de la paroi, ainsi que dans la zone de séparation des jets. Nous avons d'abord effectué un calcul sans Pdf, mais le mélange ne s'est pas enflammé. Nous portons figure 7.16 les comparaisons entre coupes de fractions molaires, pour l'écoulement inerte. On peut remarquer que l'accord est relativement satisfaisant au niveau des ordres de grandeur, mais

la différence demeure sensiblement appréciable sur les courbes, ce qui tendrait à montrer que la modélisation diffusion turbulente massique est imparfaite. Lorsque l'on introduit les effets de la turbulence, on constate bien un allumage, mais il est beaucoup trop violent par rapport aux observations expérimentales. L'écart-type en température est saturé très rapidement à sa valeur maximale, ce qui démontre l'insuffisance criante du modèle de gradient dans ce cas. Les résultats sont montrés figures 7.17 à 7.19 : on porte successivement les iso- T , les iso- Y_{OH} , les coupes de σ_T/T , limités par 0.4.

L'accord calcul-expérience s'avère être seulement qualitatif : l'allumage est situé approximativement au bon endroit mais la température maximale est de l'ordre de 2000 K alors que l'expérience indique environ 1400 K. Ceci pourrait s'expliquer selon plusieurs pistes, susceptibles d'interférer : le trop grand écartement des mailles au niveau de l'allumage, la saturation de l'écart-type en température, une prédiction incorrecte du transport turbulent de la chaleur comme des espèces, l'inadéquation du modèle de Pdf présumée en température, ou encore la non-prise en compte de la petite zone de recirculation. Ce cas apparaît en effet comme assez délicat à reproduire : la température au niveau du mélange est relativement faible du fait de la très basse température du jet d'hydrogène. L'inflammation ne peut se produire que lorsqu'une quantité suffisante d'air chaud a été entraînée dans la zone de mélange. Le phénomène de mélange turbulent est donc bien le phénomène prépondérant conduisant à l'allumage. La première approche présentée ici ne semble donc pas suffisamment adéquate pour la simulation d'un allumage contrôlé par le transport turbulent des espèces et surtout de la chaleur. Un effort de modélisation supplémentaire semble nécessaire, effort qui peut commencer par une adaptation plus fine des constantes utilisées, comme les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents.

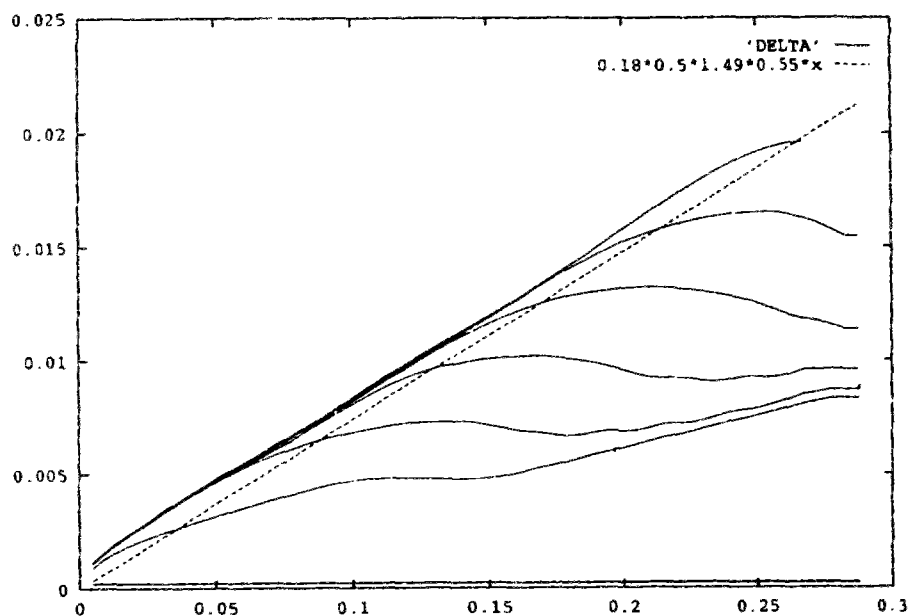


FIG. 7.6 - *Epaisseurs de vorticité pour une couche de mélange compressible air-hydrogène*

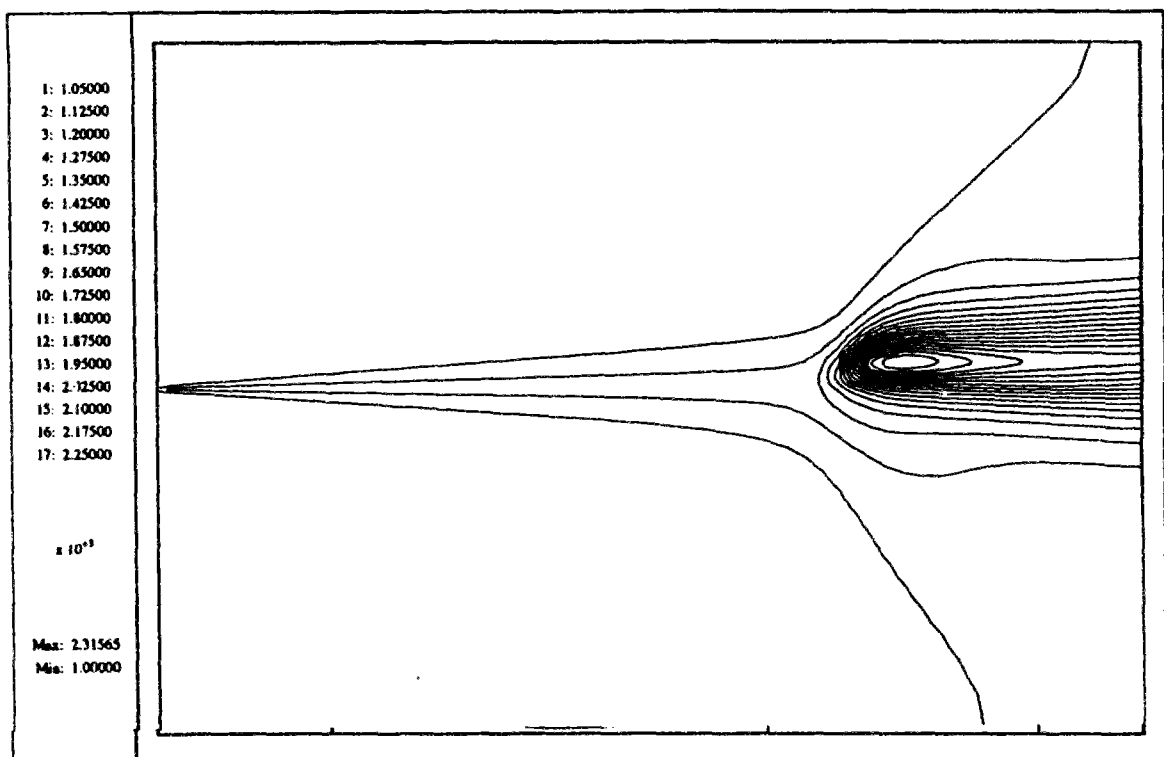
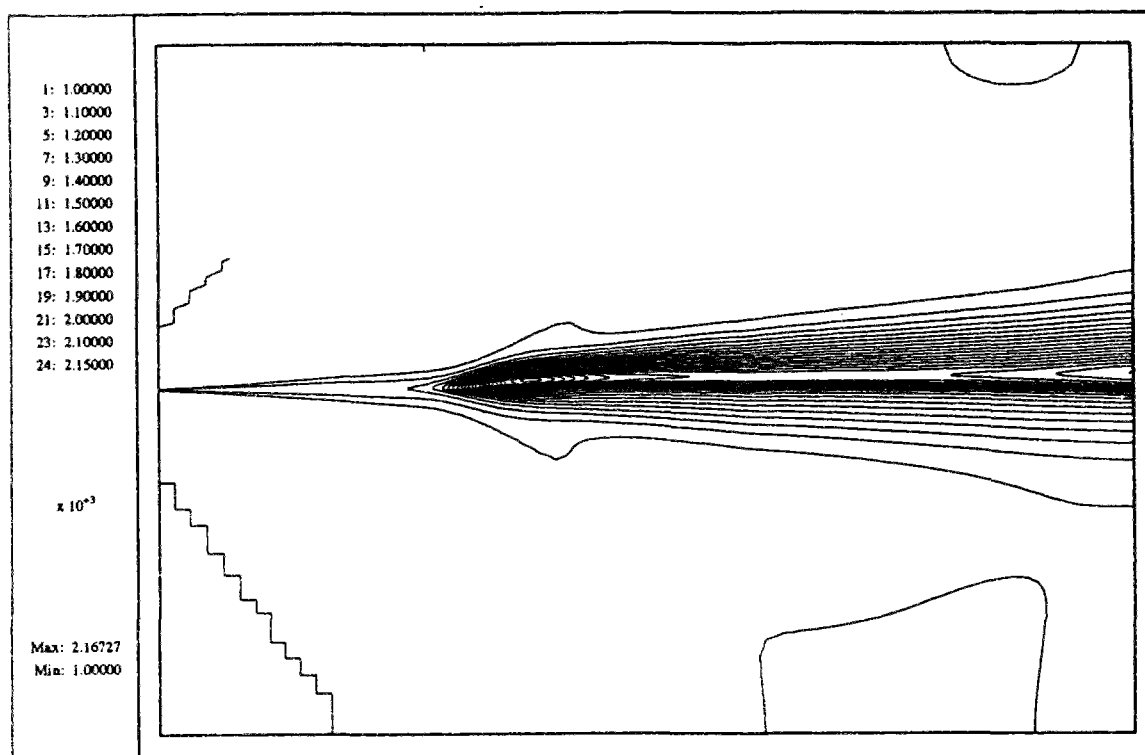
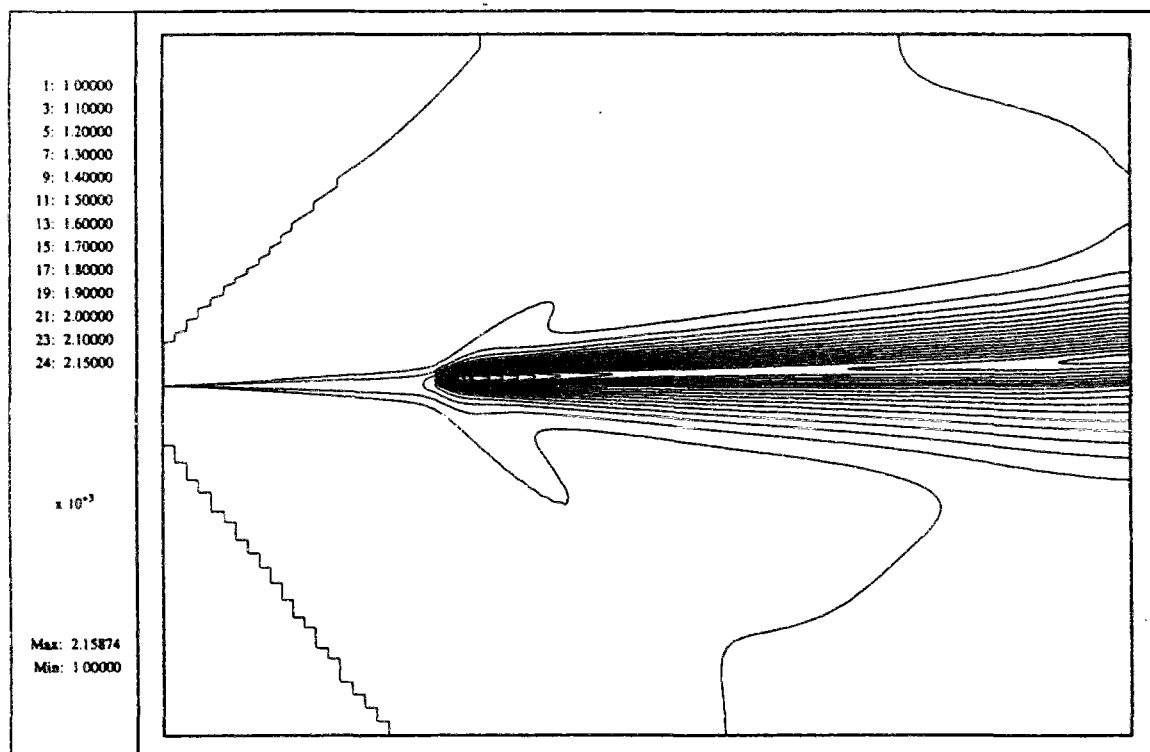


FIG. 7.7 - *Iso-temperatures pour le maillage "grossier" 61×91*

FIG. 7.8 - Iso-temperatures pour le maillage "intermédiaire" 61×181 FIG. 7.9 - Iso-temperatures pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)

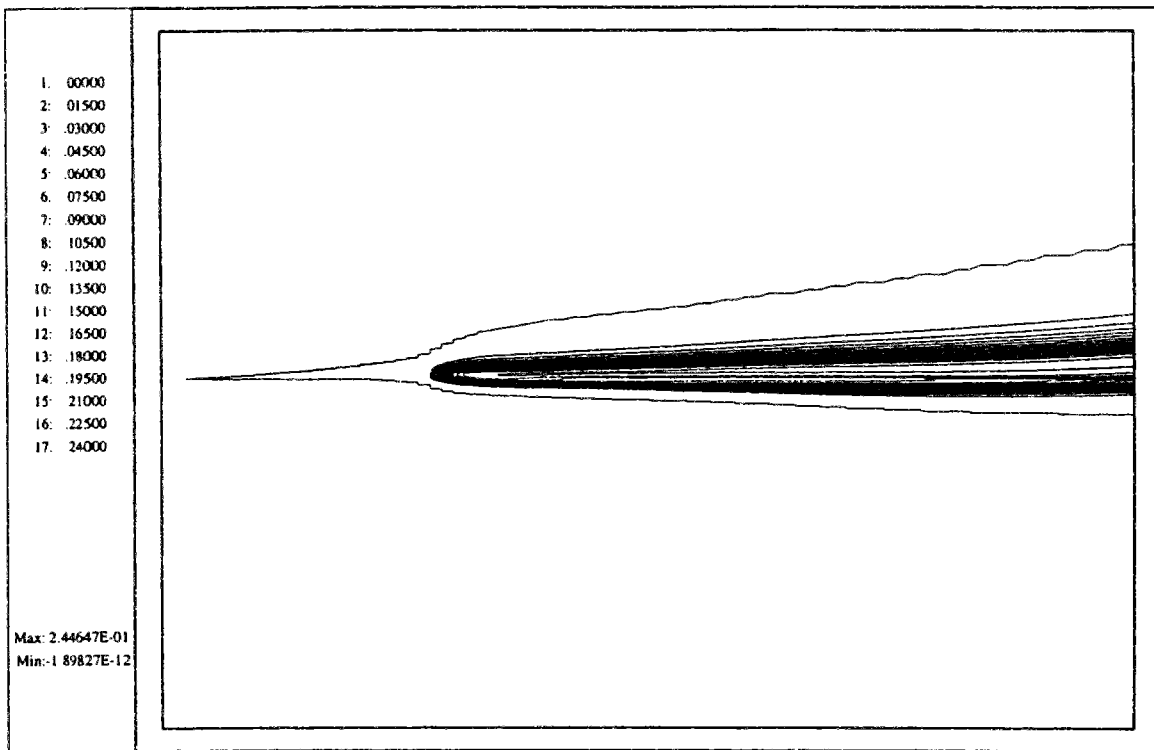


FIG. 7.10 - $Iso-Y_{H_2O}$ pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)

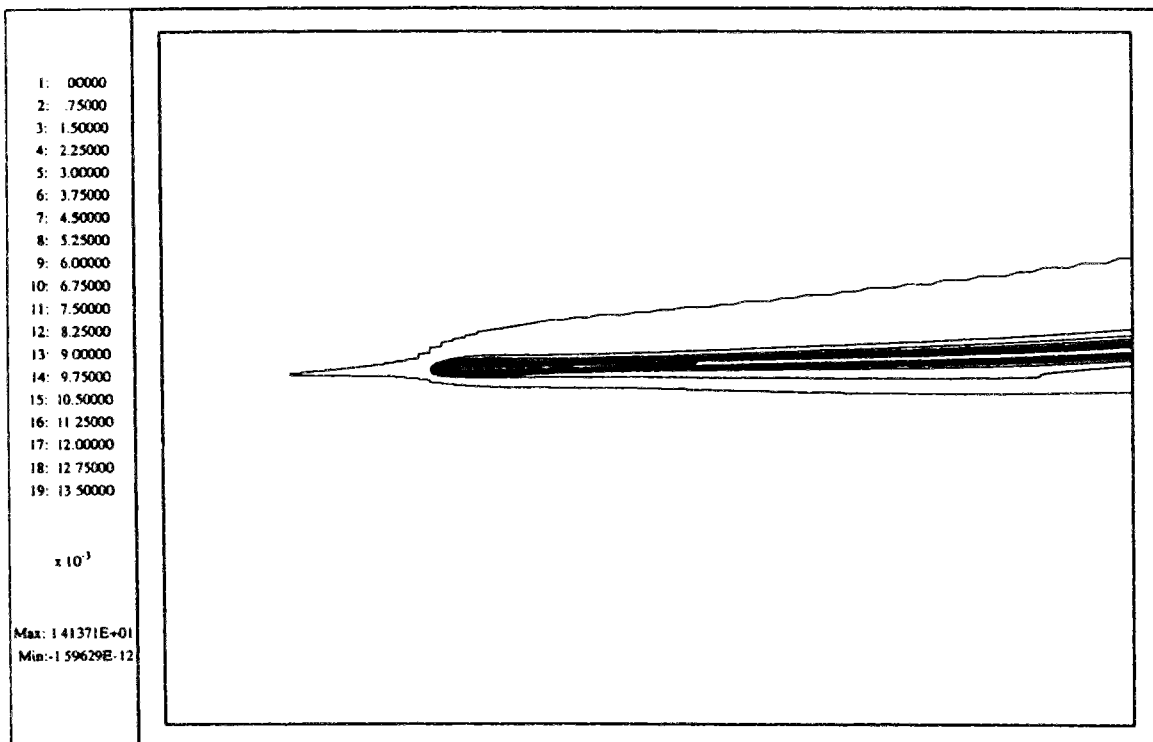


FIG. 7.11 - $Iso-Y_{OH}$ pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)

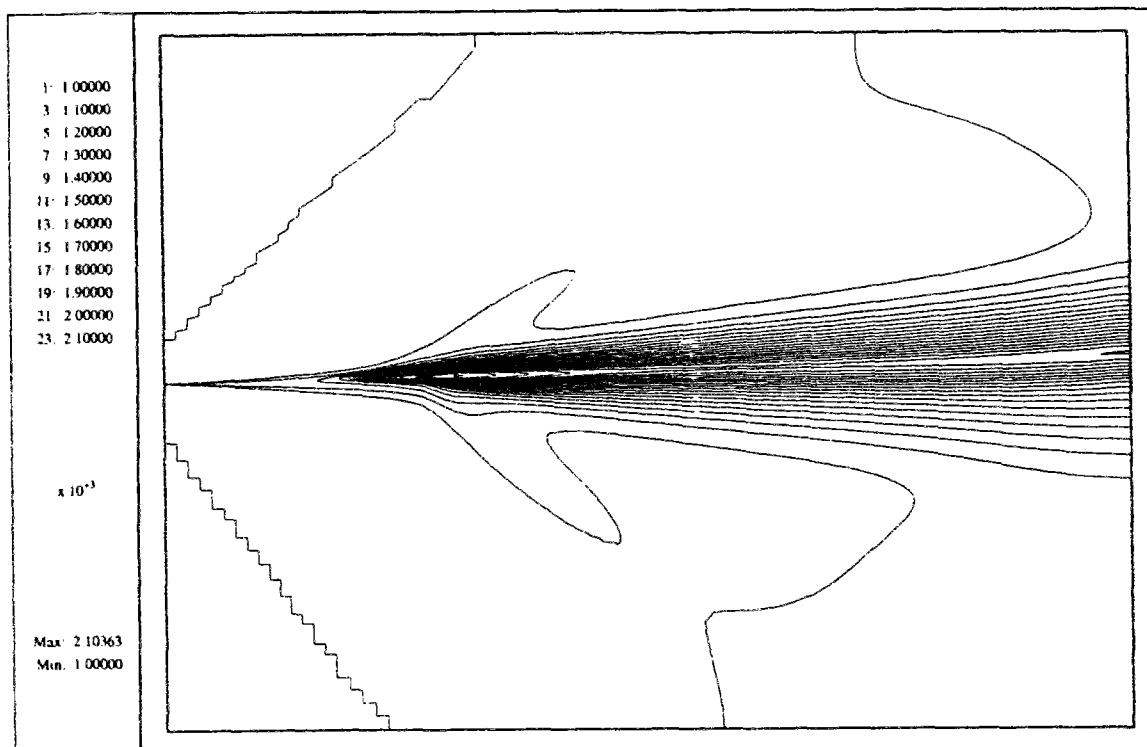
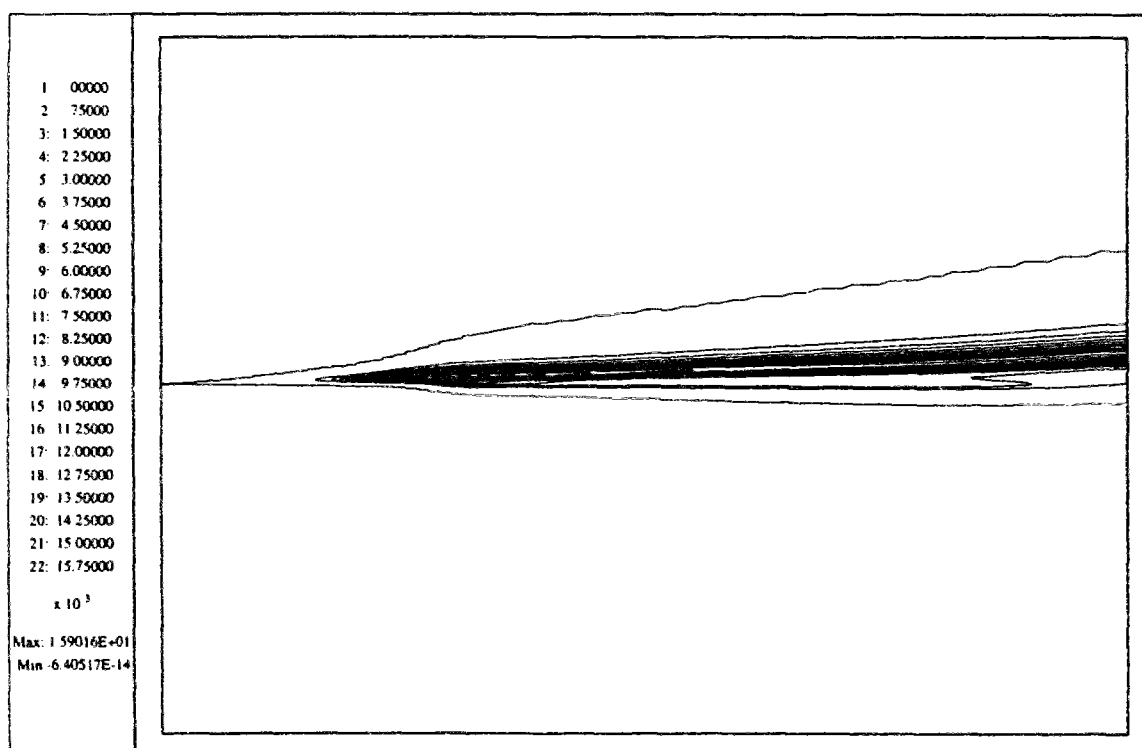


FIG. 7.12 - Iso-temperatures pour le maillage "fin" avec Pdf

FIG. 7.13 - Iso- Y_{OH} pour le maillage "fin" avec Pdf

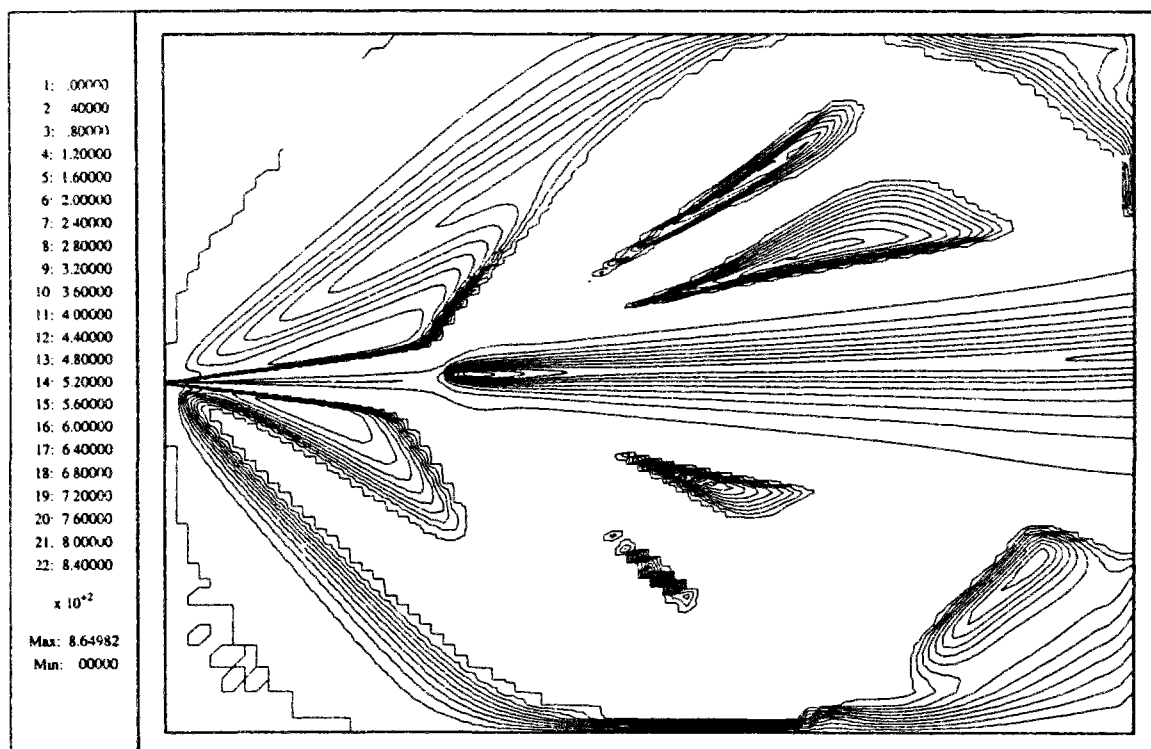


FIG. 7.14 - $Iso-Min[\sigma_T; 0.4 \times \tilde{T}]$ initiaux pour le maillage "fin" avec Pdf

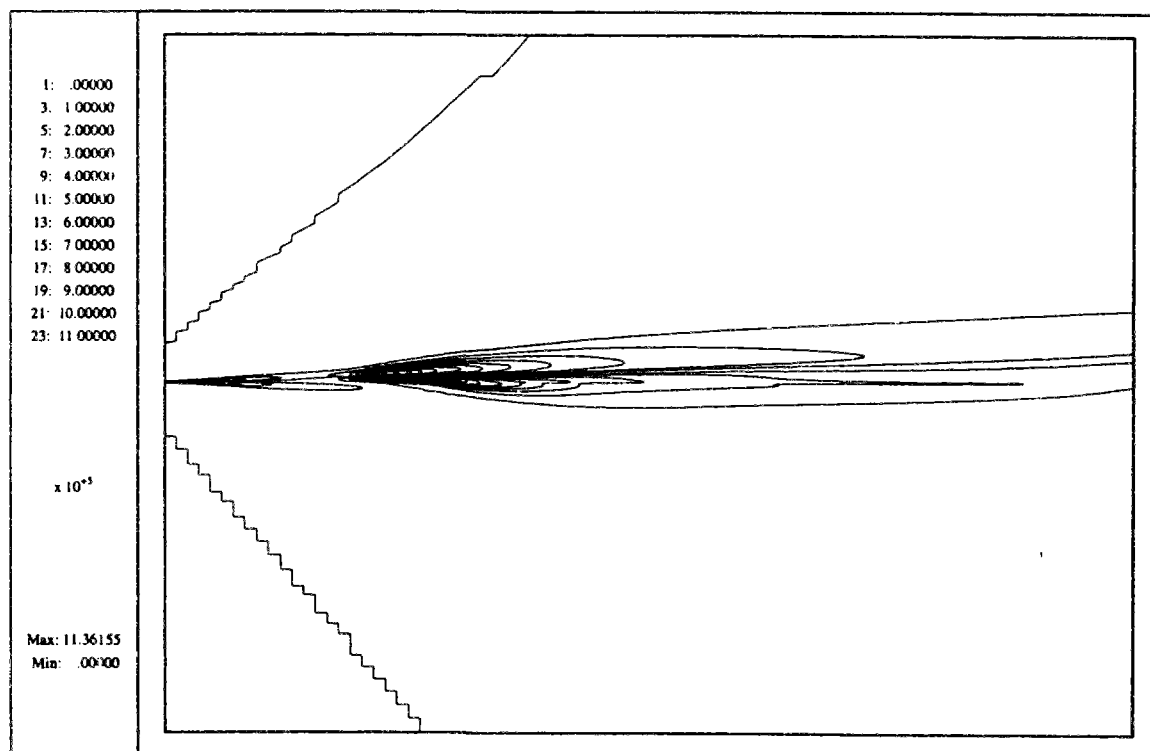


FIG. 7.15 - $Iso-\sigma_T$ pour le maillage "fin" avec Pdf

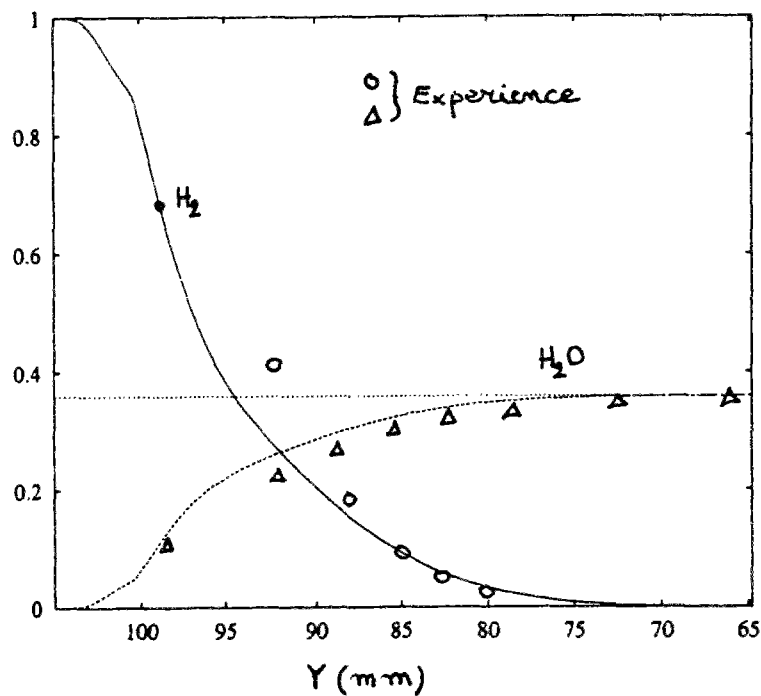


FIG. 7.16 - Expérience de Burrows et Kurkov: coupes des fractions massiques en $X = 35.6$ cm pour le cas inerte "laminaire"

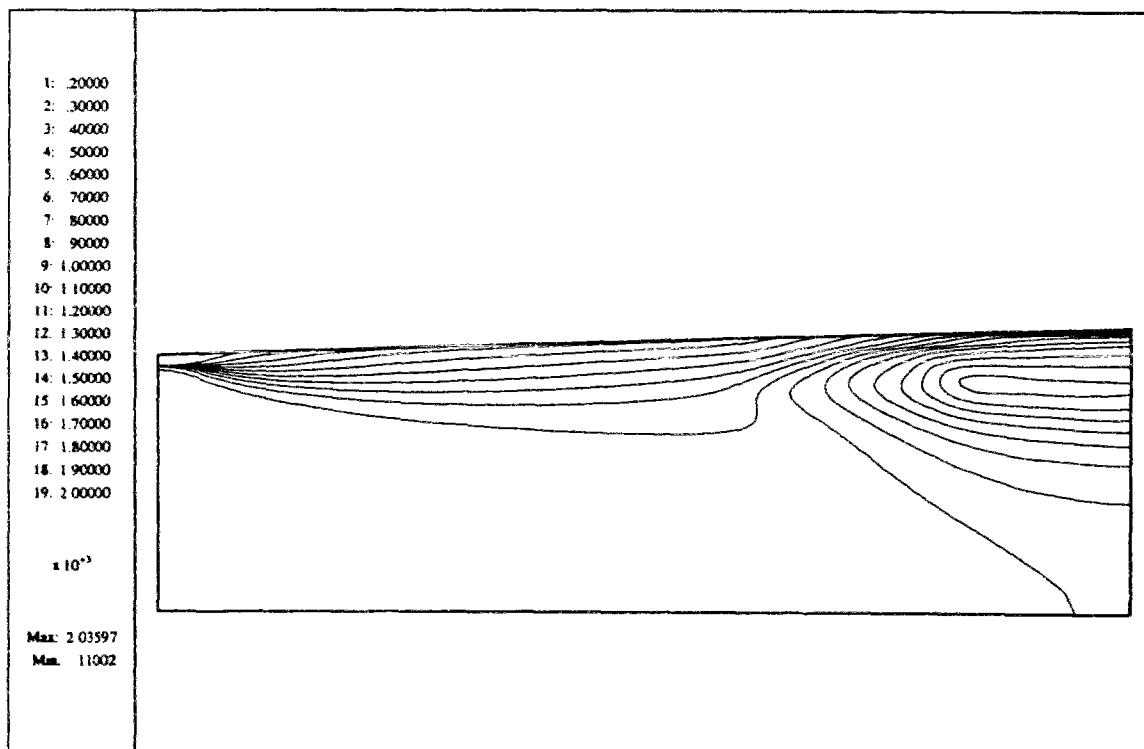


FIG. 7.17 - Expérience de Burrows et Kurkov: courbes iso-température (cas Pdf)

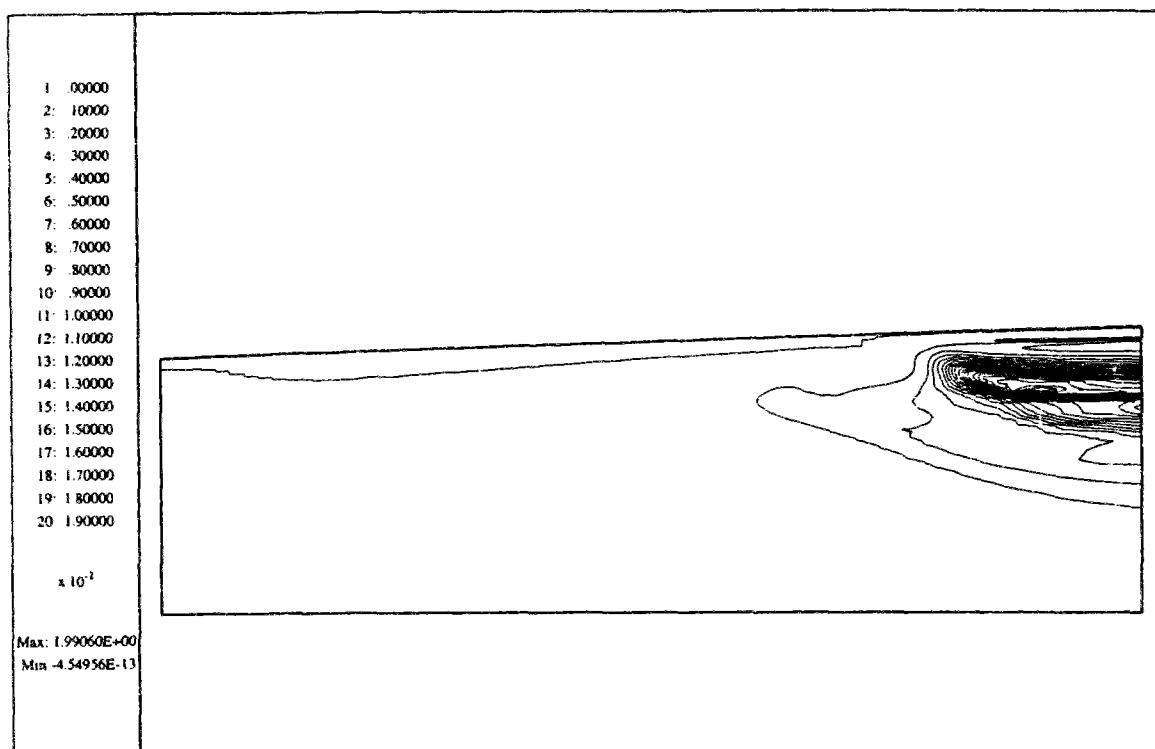


FIG. 7.18 - Expérience Burrows et Kurkov: courbes iso- Y_{OH} (cas Pdf)

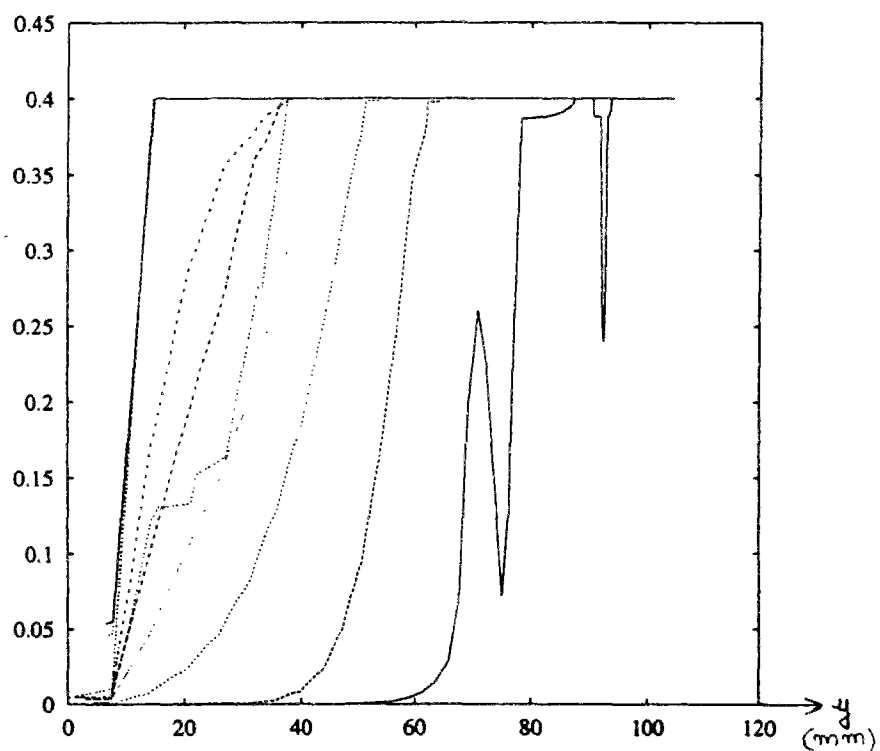


FIG. 7.19 - Expérience de Burrows et Kurkov: coupes de $\text{Max}[\sigma_T/\bar{T}; 0.4]$ (cas Pdf)

Bibliographie

- [1] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss & R.B. Bird, "Molecular Theory of Gases and Liquids", John Wiley and Sons Inc., New-York, (1954).
- [2] V. Giovangigli, "Structure et extinction de flammes laminaires prémélangées", Thèse de Doctorat d'état, Université Paris VI, (1988).
- [3] T.P. Coffee & J.M. Heimerl, "Transport Algorithms for premixed, laminar, steady-state flames", *Comb. and Flame*, **43**, pp. 273-89, (1981).
- [4] J.O. Hirschfelder & C.F. Curtiss, "Flame propagation in explosive gas mixtures", 3rd Int. Symposium on Combustion, Reinhold, New-York, pp. 121-27, (1949).
- [5] R.J. Kee, J. Warnatz & J.A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the evaluation of gas-phase viscosities, conductivities and diffusion coefficients", SANDIA Nat. Lab. Rep. SAND80-8003, (1980).
- [6] C.R. Wilke, "A viscosity equation for gaz mixtures", *Journal Chem. Phys.*, **18**, pp. 517-19, (1950).
- [7] A. Harten, "High resolution schemes for hyperbolic conservation laws", *Journ. of Comp. Phys.*, **49**, p. 357-93, (1983).
- [8] H.C. Yee, "Upwind and symmetric shock capturing schemes", NASA Tech. Mem. 89464, (1987).
- [9] H.C. Yee, "On the implementation of a class of upwind schemes for system of hyperbolic conservation laws", NASA Tech. Mem. 86839, (1985).
- [10] N. Kroll, D. Gaitonde & M. Aftosmis, "A systematic comparative study of several high resolution schemes for complex problems in high speed flows", AIAA paper 91-0636, 29th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, (1991).
- [11] S. Piperno, "Accélération d'un code 2D-volumes finis structurés résolvant les équations de Navier-Stokes pour un fluide multi-espèces réactif par un schéma implicite linéarisé", Rapport interne Dassault Aviation, Note DEA 9515, (1991).

- [12] P. Rostand & R.W. Mac Cormack, "CFD modeling of an arc-heated jet", AIAA 90-1475, 21st Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference, Seattle, WA, (1990).
- [13] P. Rostand, "A prospective study of supersonic combustion", Analatom Inc, Contracr Report 42F01237, (1990).
- [14] R.W. Mc Cormack, G.V. Candler, "The solution of the Navier-Stokes equations using Gauss-Seidel line relaxation", *Comp. and fluids*, **17**, 1, pp. 135-50, (1989).
- [15] Y. D'Angelo & B. Larrouturou, "Comparison and analysis of some numerical schemes for stiff complex chemistry problems", *Math. Mod. Num. Anal.*, (1994), *to appear* (CERMICS Report 93-21, 1993).
- [16] B.E Launder & D.B. Spalding, "The numerical computation of turbulent flows", *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, **3**, pp. 269-89, (1974).
- [17] F. Chalot, Z. Johann, M. Mallet, M. Ravachol & G. Rogé, "Development of a finite element Navier-Stokes solver with applications to turbulent and hypersonic flows", AIAA 92-0607, Reno, (1992).
- [18] C. Kasbarian, O. Lebigre, M. Mallet, B. Mantel, M. Ravachol & M. Tentillier, "Development of a finite element Navier-Stokes solver using unsteady adapted grids and applications to turbulent flows", *Proc. of the 1st Eur. Comp. & Fluid Dyn. Conf.*, Brussels, Belgium, (1992).
- [19] F. Chalot, M. Mallet & M. Ravachol, "A comprehensive finite element Navier-Stokes solver for low and high aircraft design", AIAA 94-0814, Reno, (1994).
- [20] M. Baum, T. Poinso & D. Haworth, "Using direct numerical simulation to study $H_2 - O_2$ flames with complex chemistry in turbulent flows", *soumis au Journ. of Comp. Phys.*, (1993).
- [21] S.B. Pope, "Transport equation for the joint probability function of velocity and scalars in turbulent flows", *Phys. Fluids A*, **24**, 4, pp 588-96, (1981).
- [22] Hesselberg, "Die Gesetze der ausgeglichenen atmosphärischen Bewegungen", *Beitz. Phys. forcién Atmosphere*, **12**, pp. 141-160, (1925).
- [23] G. Dedeant & P. Wehrle, "Sur les équations aux valeurs probables d'un fluide turbulent", *C.R.A.S.*, **206**, pp.1790-1791, (1938).
- [24] L. Dufour & Van Mieghen, "Thermodynamique de l'atmosphère", *Mem. Inst. Roy. Météo. de Belgique*, **30**, (1948).

- [25] A.K. Blackadar, "The transformation of energy by the large scale eddy stress in the atmosphere", *Meteor. Papers*, **1**, 4, New-York University, (1950).
- [26] A. Favre, "Equations statistiques des gaz turbulents", C.R.A.S., **246**, pp. 2576-79, 2723-25, 2839-42, 3216-19, (1958).
- [27] A. Favre, "Equations des gaz turbulents compressibles", *Journ. de Mécanique*, **4**, 3, (1965).
- [28] R.W. Bilger, "A note on Favre averaging in variable density flows", *Comb. Science and Tech.*, **11**, pp. 215-17, (1975).
- [29] J. Boussinesq, "Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section", **I-II**, Gautier-Villars, Paris, (1897).
- [30] O. Reynolds, "On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion", *Phil. Trans. Roy. Soc London A*, **186**, pp. 123-164, (1894).
- [31] G. B. Schubauer & C.M. Tchen, "Turbulent flows and heat transfer", *C.C. Lin Ed.*, Princeton University Press, (1959).
- [32] J.O. Hinze, "Turbulence", Mac Graw Hill, New-York, (1959).
- [33] P.S. Klebanoff, "Characteristics of turbulence in a boundary layer with zero pressure gradient", N.A.C.A. Tech. note 3178, (1954).
- [34] D. Vandromme, "Contribution à la modélisation et la prédiction d'écoulements turbulents à masse volumique variable", doctorat d'état, Université de Lille, (1983).
- [35] J. Cousteix, "Turbulence et couche limite", Cepadues Editions, Toulouse, (1989).
- [36] D.C. Wilcox, "Turbulence Modeling for C.F.D.", DCW Industries Inc., (1993).
- [37] S. Candel, "Mécanique des fluides", Cours de l'Ecole Centrale de Paris, (1982).
- [38] O. Zeman, "Dilatation dissipation : the concept and application in modelling compressible mixing layers", *Phys. Fluids*, **A 2**, 2, pp 178-88, (1990).
- [39] S. Sarkar, G. Erlebacher, M.Y. Hussaini, H.O. Kreiss, "The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence", ICASE report 89-79, NASA CR 181959, (1989).
- [40] W.P. Jones & B.E. Launder, "The prediction of laminarization with two-equation model of turbulence", *Int. Journ. of Heat and Mass Transfer*, **15**, pp. 301-14, (1972).
- [41] R. Struijs, P.L. Roe & H. Deconinck, "Fluctuations Splitting Schemes for the 2D Euler equations", Von Karman Institute Report, 1991-11/AR, (1991).

- [42] H. Blasius, "Grenzschichten in Flüssigkeiten mit kleiner Reibung", *Z. Math. Phys.*, **56**, pp. 1-37, (1908).
- [43] H. Schlichting, "Boundary Layer Theory", McGraw-Hill, 1955.
- [44] D. Papamoschou & A. Roshko, "The compressible turbulent shear layer : an experimental study", *J. Fluid Mech.*, **197**, pp. 453-77, (1988).
- [45] G.L. Brown & A. Roshko, "On density effects and large structure in turbulent mixing layers", *J. Fluid Mech.*, **64**, 4, pp. 775-816, (1974).
- [46] D.W. Bogdanoff, "Compressibility effects in turbulent shear layers", *AIAA J.*, **21**, pp. 926-27, (1983).
- [47] S.F. Birch & J.M. Eggers, "A critical review of the experimental data for developed free turbulent shear layer", Proc. of the Free Shear Flows Conference, NASA SP 321, (1972).
- [48] R. Dautray & J.L. Lions, *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, Tome 1, p.1391, Masson, Paris (1984).
- [49] *Handbook of Mathematical Functions*, p. 1026, M. Abramovitz & I.A. Stegun Eds., Dover Publications, New-York.
- [50] *ibidem*, p.374, eq. 9.6.1.
- [51] *ibidem*, p.375, eq. 9.6.13.
- [52] *ibidem*, p.378, eq. 9.8.1.
- [53] F.E. Marble & J.E. Broadwell, "The coherent flame model for turbulent chemical reactions", Project Squid tech. rep. TRW-9-PU, Purdue University, (1977).
- [54] F. Lacas, "Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente dans les moteurs fusées cryotechniques", Thèse, Ecole Centrale Paris, (1989).
- [55] W. Mell, G. Koàly & J.J. Riley, "An investigation of closure Models for nonpremixed turbulent reacting flows", AIAA 93-0104, 31st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, (1993).
- [56] S.B. Pope, "Transport equation for the joint probability function of velocity and scalars in turbulent flows", *Phys. Fluids A*, **24**, 4, pp 588-96, (1981).
- [57] A.T. Hsu, Y.-L.P. Tsai & M.S. Raju, "A PDF approach for compressible turbulent reacting flows", AIAA 93-0087, 31st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, (1993).

- [58] S. Frankel, P. Drummond & H. Hassan, "A hybrid Reynolds averaged/PDF closure model for supersonic turbulent combustion", AIAA 90-1573, 21st Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers conference, Seattle, (1990).
- [59] R. Chandrasekhar & S.N. Tiwari, "Application of a Reynolds Stress Turbulence Model to a Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame", AIAA 91-1786, 22nd Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference, Honolulu, Hawaii, (1991).
- [60] R. Villasenor, R.W. Pitz & J.-Y. Chen, "Interaction between chemical reaction and turbulence in supersonic non premixed H_2 -air combustion", AIAA 91-0375, 29th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, (1991).
- [61] Handbook of Mathematical Functions, M. Abramovitz & I.A. Stegun Eds., Dover Publications, New-York.
- [62] R.L. Gaffney, Jr., J.A. White, S.S. Girimaji & J.P. Drummond, "Modelling turbulent/chemistry interactions using assumed Pdf methods", AIAA 92-3638, 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit, Nashville, (1992).
- [63] M.C. Burrows & A.P. Kurkov, "Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Stream", NASA TM X-2827, (1973).

Conclusions et perspectives

Les deux volets de cette thèse constituent deux voies d'investigations de la combustion supersonique, et plus généralement des écoulements réactifs à grande vitesse.

Les travaux présentés dans la première partie permettent de mieux comprendre les phénomènes de stabilisation de la flamme par effet de Mach, pour un écoulement supersonique prémélangé air-hydrogène. En particulier, l'analyse du chapitre 1 a montré que l'introduction des effets liés à la combustion était absolument nécessaire pour une description correcte de l'écoulement. En effet, le dégagement de chaleur influe fortement sur la structure géométrique des ondes de chocs et ainsi sur les limites d'apparition de l'effet de Mach et de sa stabilisation. A notre connaissance, une telle analyse, incluant en outre l'estimation des distances d'allumages locales à l'aval des chocs, n'avait pas été effectuée. D'un point de vue plus numérique, l'analyse menée au deuxième chapitre a montré l'inadéquation, pour une cinétique chimique fortement exothermique, des méthodes de résolutions usuellement employée pour une cinétique globalement endothermique ou faiblement exothermique. Enfin, pour conclure cette partie, sont présentés des résultats numériques bidimensionnels obtenus à l'aide de la méthode à pas fractionnaires que nous avons développée. Ces résultats montrent encore de fortes difficultés de stabilisation de la flamme, vraisemblablement liées à des effets plus spécifiquement bidimensionnels tels que les interactions choc-ondes de raréfaction, ou choc-paroi, et pour lesquelles il serait intéressant de pousser les investigations.

La deuxième partie est constituée de validations et d'extensions numériques de méthodes et de codes de calculs amont encore en cours de développement chez DASSAULT Aviation. L'étude d'une couche de mélange compressible réactive turbulente air-hydrogène se situe dans le cadre des premiers essais de modélisation numérique des effets turbulents sur la cinétique chimique chez DASSAULT Aviation. Des validations numériques assez fines ont ainsi pu être réalisées pour des cas académiques, tels qu'une plaque plane, une couche de diffusion, des couches de mélanges compressibles. Pour ces cas, ou bien nous disposons de résultats analytiques ou expérimentaux provenant de la littérature, ou bien encore nous avons effectué directement des calculs analytiques dans des cas simplifiés. Une première approche par fonc-

tion de densité de probabilité sur la température a finalement été présentée au chapitre 7, et les calculs effectués sont comparés avec des résultats numériques et expérimentaux de la littérature.

Plusieurs autres extensions de ces travaux sont également envisageables. Dans le contexte de développements de codes industriels amont, une perspective intéressante pourra consister à tenter de résoudre tout le système comportant les équations de conservation des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie, plus les équations de bilan pour k et ϵ de façon globale, en couplant en même temps le modèle de combustion turbulente. En outre, et comme il a déjà été évoqué dans l'introduction, d'autres modèles pourront être testés, et choisis et adaptés selon les cas de calculs. Les travaux menés sur l'intégration de la cinétique chimique pourront se prolonger par des études d'autres méthodes, comme des méthodes de Newton modifiées ou GMRes. Enfin, une adaptation moins sensible au cas de calcul du critère de raffinement-déraffinement permettrait son utilisation plus systématique, sans essais de mise au point préalables.

Table des figures

0.1	Réflexion par effet de Mach	3
1.1	Volume de contrôle	17
1.2	Configuration avec un angle de déflexion δ négatif	19
1.3	Réflexion "normale"	31
1.4	Configuration générale de l'effet de Mach	32
1.5	Configuration particulière: effet de Mach "en état permanent"	33
1.6	Réflexion par effet de Mach	34
1.7	interaction choc réfléchi-onde de raréfaction	34
1.8	Polaires donnant l'angle du choc ε en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)	38
1.9	Polaires donnant la température aval (K) en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)	39
1.10	Polaires donnant la pression aval (atm) en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)	40
1.11	Polaires donnant le nombre de Mach aval en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)	41
1.12	Polaires donnant la masse volumique aval (kg.m^{-3}) en fonction de l'angle de déflexion δ (deg.)	42
1.13	Polaires donnant l'angle du choc réfléchi ε_2 (deg.) en fonction de l'angle du choc incident ε_1 (deg.)	43
1.14	Polaires donnant l'angle du choc réfléchi ε_2 (deg.) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)	43
1.15	Polaires donnant la température aval au choc réfléchi (K) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)	44
1.16	Polaires donnant la pression aval au choc réfléchi (atm) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)	44
1.17	Polaires donnant le nombre de Mach aval au choc réfléchi en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)	45
1.18	Polaires donnant la masse volumique aval au choc réfléchi (kg.m^{-3}) en fonction de l'angle de déflexion δ_1 (deg.)	45

1.19	Détermination du point 2, 3 : $\delta_1 = 24.62$ deg., état 2 inerte	48
1.20	Cas choc droit : évolution de T , P , u et Y_{H_2O}	51
1.21	Cas choc droit : évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}	52
1.22	Cas état 3 inerte : évolution de T , P , u et Y_{H_2O}	53
1.23	Cas état 3 inerte : évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}	54
1.24	Cas état 3 "brûlé" : évolution de T , P , u et Y_{H_2O}	55
1.25	Cas état 3 "brûlé" : évolution de Y_{OH} , $Y_{H_2O_2}$, Y_H et Y_{HO_2}	56
2.1	Temperature evolution for both 9-19 and 10-16 models.	69
2.2	Mass fractions evolution for the 9-19 model.	70
2.3	Mass fraction evolution for the 10-16 model.	71
2.4	Ignition delay as a function of the initial temperature.	73
2.5	Maximal time steps for the first-order explicit method.	74
2.6	Maximal time steps for the RK2 method.	74
2.7	Maximal time steps for the UL method.	75
2.8	Maximal time steps for the CL method.	75
2.9	Maximal time steps for the UN method.	76
2.10	Maximal time steps for the CN method.	76
2.11	Variable time step and HO_2 mass fraction for the first-order explicit method. .	78
2.12	Variable time step, temperature and mass fractions profiles for the RK2 method.	79
2.13	Variable time step and mass fractions profiles for the UL method.	80
2.14	Variable time step and mass fractions profiles for the CL method.	80
2.15	Variable time step, temperature and mass fractions profiles for the UN method.	81
2.16	The equilibrium curve.	84
2.17	The equilibrium curve and the curve $Y = Y^*(T)$	86
3.1	Computational Integration Cell C_i	108
3.2	Structure of the Riemann Problem solution	111
3.3	Case I : Computational grid 200×30 nodes	143
3.4	Case I : Temperature (K)	145
3.5	Case I : Pressure ($10^5 Pa$)	147
3.6	Case I : Mach number	147
3.7	Case I : H_2O mass fraction	149
3.8	Case I : H mass fraction	149
3.9	Case I : OH mass fraction	151
3.10	Case I : H_2O_2 mass fraction	151
3.11	Case II : Computational grid	153
3.12	Case II : Temperature (K)	155
3.13	Case II : Zoom on temperature around triple point	155

3.14	Case II: Pressure ($10^5 Pa$)	157
3.15	Case II: Mach number	157
3.16	Case III: Temperature (K) after 29×80 iterations	159
3.17	Case III: Temperature (K) after 40×80 iterations	159
3.18	Case III: OH mass fraction after 29×80 iterations	161
3.19	Case III: OH mass fraction after 40×80 iterations	161
3.20	Case III: H_2O mass fraction after 29×80 iterations	163
3.21	Case III: H_2O mass fraction after 40×80 iterations	163
3.22	Case IV.a: Temperature (K) after 15×80 iterations	165
3.23	Case IV.a: Temperature (K) after 21×80 iterations	165
3.24	Case IV.a: H_2O_2 mass fraction after 15×80 iterations	167
3.25	Case IV.a: H_2O_2 mass fraction after 21×80 iterations	167
3.26	Case IV.a: Temperature after 46×80 iterations (convergence)	169
3.27	Case IV.b: Temperature after 22×80 iterations	169
3.28	Case IV.b: H_2O mass fraction after 6×80 iterations	171
3.29	Case IV.b: H_2O mass fraction after 13×80 iterations	171
3.30	Case IV.b: Temperature after 13×80 iterations	173
3.31	Case IV.b: OH mass fraction after 13×80 iterations	173
6.1	Couche limite le long d'une plaque plane	209
6.2	Coefficients de frottements en laminaire: paroi adiabatique	211
6.3	Coefficients de frottements en laminaire: paroi isotherme	212
6.4	Coefficients de frottements dans le cas turbulent	213
6.5	Couche de diffusion	213
6.6	Couche de diffusion plane $N_2 - N_2$	216
6.7	Couche de diffusion plane $N_2 - N_2$ et $H_2 - H_2$	217
6.8	Couche de diffusion plane et axisymétrique	218
6.9	Couche de mélange	219
6.10	Taux de croissance normalisé pour un écoulement compressible	220
6.11	Courbe de Langley pour une couche de mélange compressible	221
6.12	Evolution de l'épaisseur de vortacité $M_{c1} = 0.75$	222
6.13	Evolution de l'épaisseur de vortacité $M_{c1} = 1.5$	223
6.14	Contour d'intégration Γ	225
7.1	Vitesse de réaction, fonction β et produit: cas (a) et (b)	237
7.2	Formules d'intégration de Gauss générales: cas (a)	238
7.3	Formules d'intégration de Gauss générales: cas (b)	239
7.4	Formules d'intégration de Gauss, pondérées par β : cas (a)	240
7.5	Configuration de l'expérience de Burrows et Kurkov	243

7.6	Epaisseurs de vorticit� pour une couche de m�lange compressible air-hydrog�ne	245
7.7	Iso-temp�ratures pour le maillage "grossier" 61×91	245
7.8	Iso-temp�ratures pour le maillage "interm�diaire" 61×181	246
7.9	Iso-temp�ratures pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)	246
7.10	Iso- Y_{H_2O} pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)	247
7.11	Iso- Y_{OH} pour le maillage "fin" 81×301 (sans Pdf)	247
7.12	Iso-temp�ratures pour le maillage "fin" avec Pdf	248
7.13	Iso- Y_{OH} pour le maillage "fin" avec Pdf	248
7.14	Iso- $\text{Min}[\sigma_T; 0.4 \times \tilde{T}]$ initiaux pour le maillage "fin" avec Pdf	249
7.15	Iso- σ_T pour le maillage "fin" avec Pdf	249
7.16	Exp�rience de Burrows et Kurkov : coupes des fractions massiques en $X = 35.6$ cm pour le cas inerte "laminaire"	250
7.17	Exp�rience de Burrows et Kurkov : courbes iso-temp�rature (cas Pdf)	250
7.18	Exp�rience Burrows et Kurkov : courbes iso- Y_{OH} (cas Pdf)	251
7.19	Exp�rience de Burrows et Kurkov : coupes de $\text{Min}[\sigma_T/\tilde{T}; 0.4]$ (cas Pdf)	251

Table des matières

I	FLAMMES LAMINAIRES PRÉMÉLANGÉES	11
1	Etude phénoménologique de l'effet de Mach	15
1.1	Introduction	15
1.2	Modèle et systèmes d'équations	16
1.2.1	Relations pour les chocs obliques stationnaires	17
1.2.2	Résolution pour un mélange caloriquement parfait	20
1.2.3	Discussion du cas caloriquement parfait	21
1.2.4	Résolution numérique pour des enthalpies polynomiales	25
1.3	Relaxation chimique	27
1.3.1	Système d'équations	27
1.3.2	Modèle thermodynamique réel et modèle d'Arrhenius	28
1.3.3	Résolution numérique du système algébro-différentiel	29
1.4	Réflexion normale et effet de Mach	30
1.4.1	Réflexion normale	30
1.4.2	Effet de Mach	32
1.5	Résultats numériques	35
1.5.1	Obtention des polaires de choc	35
1.5.2	Obtention des conditions en aval du choc réfléchi	37
1.5.3	Analyse de l'effet de Mach	46
1.5.4	Détermination des distances d'induction	49
1.6	Conclusions et perspectives	50
	Bibliographie	57
2	Comparaison et Analyse de Schémas Numériques pour la Résolution de Problèmes de Cinétique Chimique Complexe Raide	61
2.1	Introduction	61
2.2	Governing equations	62
2.2.1	The two-dimensional reactive Euler equations	62
2.2.2	One-cell model	64

2.3	Numerical experiments	66
2.3.1	The numerical methods	66
2.3.2	The test-case: hydrogen-air combustion	68
2.3.3	First numerical experiment	69
2.3.4	Second numerical experiment	72
2.3.5	Third numerical experiment	77
2.4	Numerical analysis of some simple models	82
2.4.1	The simple reversible model	82
2.4.2	The one-step reaction	89
2.4.3	Global hydrogen-oxygen reactions	90
2.4.4	A remark about the fractional-step approach	93
2.5	Conclusions	94
3	Simulation numérique d'écoulements réactifs instationnaires	103
3.1	Introduction	103
3.2	Governing equations	104
3.2.1	The two-dimensional reactive Euler equations	104
3.2.2	Arrhenius Chemical Model	105
3.2.3	A Fractional-Step Approach	107
3.3	Linear Algebra	109
3.3.1	Homogeneity	109
3.3.2	The Riemann Problem	110
3.3.3	Derivation of the Jacobian Matrix Q	111
3.3.4	Derivation of the eigenvalues and right eigenvectors	113
3.3.5	Riemann Invariants	114
3.4	Extensions of Roe and Osher Riemann Solvers	116
3.4.1	Roe Solver	116
3.4.2	Roe-type average	117
3.4.3	Entropic correction	118
3.4.4	Multi-component Osher solver	119
3.4.5	Osher-type Numerical Flux	119
3.4.6	Approximate Riemann invariants	122
3.4.7	An alternate multi-component extension: the "BL" approximate Riemann flux	123
3.4.8	Boundary Conditions	124
3.5	Second-Order Accuracy	125
3.6	Solvers for the Species Conservation Equations	127
3.6.1	Point-wise resolution	127

3.6.2	Choice of the package	128
3.7	Numerical results	128
3.7.1	Fifteen-degree Ramp	129
3.7.2	Non Reactive Smoothed Ramp	130
3.7.3	Mach Effect	130
3.7.4	Ignition instabilities	131
3.8	Conclusions	132
3.9	Appendix	133
3.9.1	Determination of the eigenvalues and right eigenvectors of Q	133
3.9.2	Partial derivatives of the pressure and the temperature	134
3.9.3	Derivation of the scalar products	135
3.9.4	Expression of W in the eigenvectors basis	139
3.9.5	Hermitian Gradients limitation technique	140

II EFFETS DIFFUSIFS ET TURBULENTS

179

4 Simulation numérique d'écoulements laminares visqueux réactifs stationnaires

183

4.1	Introduction	183
4.2	Système d'équations	183
4.2.1	Equations de Navier-Stokes bidimensionnelles	184
4.2.2	Géométrie axisymétrique	187
4.3	Formulation volumes finis structurés et schéma T.V.D.	187
4.3.1	Discretisation spatiale et approximation temporelle	187
4.3.2	Schéma T.V.D.	188
4.3.3	Limiteurs de flux	189
4.3.4	Conditions aux limites	190
4.4	Schéma implicite linéarisé	191
4.4.1	Limitation du pas de temps	191
4.4.2	Principe de l'implication	191
4.4.3	Linéarisation des termes convectifs	193
4.5	Terme source chimique	193
4.5.1	Linéarisation complète	193
4.5.2	Chimie "explosive"	194

5 Modèle de turbulence

197

5.1	Introduction	197
5.2	Equations de Reynolds	197

5.2.1	Différentes notions de moyennes	198
5.2.2	Equations moyennées	200
5.3	Transport turbulent	201
5.3.1	Modèles algébriques	202
5.3.2	Equation de bilan pour l'énergie cinétique turbulente	203
5.4	Un modèle à deux équation : $k - \epsilon$	204
5.4.1	Equation sur k	204
5.4.2	Modélisation de $\overline{v_i'' \tau_{ij}}$	205
5.4.3	Modélisation de $\frac{1}{2}(\rho v_j'' v_i'' v_i'')_{,j}$	206
5.4.4	Equation finale sur k	206
5.4.5	Equation sur ϵ	206
5.5	Traitement numérique	207
5.5.1	Schéma monotone pour l'advection	207
5.5.2	Discretisation temporelle	207
5.5.3	Résolution du système	207
5.5.4	Extension axisymétrique	208
5.5.5	Conditions aux bords	208
6	Quelques validations numériques	209
6.1	Plaque plane	209
6.1.1	Cas laminaire	209
6.1.2	Cas turbulent	211
6.2	Couche de diffusion	212
6.2.1	Cas plan	214
6.2.2	Cas axisymétrique	214
6.2.3	Comparaison calculs-théorie	215
6.3	Couche de mélange turbulente compressible non réactive	216
6.3.1	Résultats théoriques et expérimentaux	216
6.3.2	Résultats numériques	221
6.4	Annexe	224
6.4.1	Solution analytique de la couche de diffusion plane	224
6.4.2	Résolution analytique de la couche de diffusion axisymétrique	227
7	Couche de mélange turbulente réactive	231
7.1	Introduction	231
7.2	Moyenne statistique du terme source chimique	232
7.2.1	Densité de probabilité en température et concentrations	232
7.2.2	Densités de probabilité présumées	233
7.2.3	Equation pour la variance	234

7.3	Intégration numérique	235
7.3.1	Formules de Gauss	235
7.3.2	Etude paramétrique et comparaisons	236
7.4	Couche de mélange turbulente réactive	241
7.4.1	Calcul préalable non réactif	241
7.4.2	Effet du maillage sur l'allumage	241
7.4.3	Introduction de la Pdf	242
7.5	Expérience de Burrows et Kurkov	242

RÉSUMÉ

L'objet de ce travail concerne l'analyse et la simulation numérique d'écoulements supersonique réactifs. Dans une première partie, on étudie la stabilisation d'une flamme par effet de Mach au sein d'un écoulement air-hydrogène prémélangé bidimensionnel. On présente d'abord une analyse phénoménologique des conditions d'allumage et de stabilisation d'une flamme à l'aval d'un système stationnaire d'ondes de chocs. Cette étude montre qu'il est nécessaire de tenir compte de la réaction chimique dans la structure considérée. On explore ensuite la stabilité de quelques méthodes implicites et linéairement implicites pour la résolution des équations de la cinétique chimique complexe explosive air-hydrogène, et on effectue également l'analyse de stabilité de tels schémas dans des cas simplifiés, montrant en particulier leur inadéquation pour des cinétiques rapides et trop fortement exothermiques. Pour des simulations stationnaires ou instationnaires, on adopte une méthode à pas fractionnaires fondée d'une part sur un solveur de Riemann multi-espèces explicite du deuxième ordre, en volumes finis non structurés, et d'autre part sur un solveur spécialisé pour la chimie, tel que LIMEX ou LSODE. On termine cette partie par quelques résultats de simulations bidimensionnelles, pour une combustion air-hydrogène avec cinétique complexe et loi d'état réaliste. Le deuxième volet aborde l'étude des phénomènes de transports diffusif et turbulent. La méthode de résolution des équations de Navier-Stokes est fondée sur une formulation volumes finis structurés. Le deuxième ordre est atteint par le schéma T.V.D. de Harten, qui se rapporte identiquement au flux de Roe au premier ordre. Pour accélérer la convergence vers un état stationnaire, on utilise un schéma implicite linéarisé. L'inversion du système linéaire résultant s'effectue grâce à une méthode de Gauss-Seidel par lignes. Le terme source chimique fait l'objet d'un traitement particulier, visant à conserver des propriétés de positivité des valeurs propres des matrices jacobiniennes intervenant dans l'implicitation. Les effets de la turbulence sont pris en compte par un modèle k-epsilon, et l'interaction cinétique-chimique-turbulence par une approche en densité de probabilité présumée en température. Des essais numériques sont alors effectuées d'abord dans quelques situations académiques, en particulier pour une couche de mélange compressible à masse volumique fortement variable. On termine par des comparaisons avec des résultats de la littérature de couche de mélange réactive air-hydrogène, ainsi qu'une expérience de combustion supersonique.

ABSTRACT

The aim of this thesis is the analysis and the numerical solution of supersonic complex-chemistry reactive flows. In a first part, we are interested in the flame stabilization by a Mach reflection, for ramp-shaped or smoothed-ramp-shaped two-dimensional geometries. The analysis of the ignition beyond a steady shock waves structure shows that one must take into account the combustion phenomena to get the correct structure of the shocked flow. We then compare and analyse some implicit and linear implicit schemes for the resolution of such stiff complex chemistry problems. In particular, we show that this kind of approach is totally inefficient for a stiff and strongly exothermic chemistry. We then adopt a fractional-step method, suitable for both steady and unsteady calculations. This method is based on an explicit multi-component second-order Riemann solver, for unstructured meshes, and on a specialized ODE or DAE solver for the chemistry. This part ends with some 2D numerical simulations, for a complex-chemistry hydrogen-air combustion, with a realistic equation of state.

In a second part, we introduce the effect of diffusive and turbulent transport. The "laminar" Navier-Stokes solver is based on a T.V.D. 2nd-order accurate Harten scheme for structured meshes. The steady state can be reached more quickly by using a linear implicit method. The resulting linear system is then solved by a Gauss-Seidel line relaxation. For the chemical source term, the specific numerical strategy is aimed to preserve some positivity property for the eigenvalues of the Jacobian matrices involved in the linearization. Turbulence is taken into account via a k-epsilon model and the influence of the turbulent fluctuations upon chemistry rates via an assumed Pdf approach for the temperature. The numerical code is then first runned on some academic situations, including a variable-density compressible shear layer calculation. We then end with a comparison of a calculation of reacting air-hydrogen compressible shear layer and a supersonic combustion experiment.